

This Page Is Inserted by IFW Operations
and is not a part of the Official Record

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

**As rescanning documents *will not* correct images,
please do not report the images to the
Image Problem Mailbox.**

THIS PAGE BLANK (USPTO)

EP

US

PCT

特 許 協 力 条 約

09/10/236

国際調査報告

(法8条、法施行規則第40、41条)
[PCT18条、PCT規則43、44]

出願人又は代理人 の書類記号 SCC 97-06 PCT	今後の手続きについては、国際調査報告の送付通知様式(PCT/ISA/220) 及び下記5を参照すること。	
国際出願番号 PCT/JP97/03924	国際出願日 (日.月.年) 29.10.97	優先日 (日.月.年) 06.11.96
出願人(氏名又は名称) 住友化学工業株式会社		

国際調査機関が作成したこの国際調査報告を法施行規則第41条(PCT18条)の規定に従い出願人に送付する。
この写しは国際事務局にも送付される。

この国際調査報告は、全部で 3 ページである。

☐ この調査報告に引用された先行技術文献の写しも添付されている。

1. ☐ 請求の範囲の一部の調査ができない(第I欄参照)。

2. ☐ 発明の単一性が欠如している(第II欄参照)。

3. ☐ この国際出願は、ヌクレオチド及び/又はアミノ酸配列リストを含んでおり、次の配列リストに基づき国際調査を行った。

☐ この国際出願と共に提出されたもの

☐ 出願人がこの国際出願とは別に提出したもの

☐ しかし、出願時の国際出願の開示の範囲を越える事項を含まない旨を記載した書面が添付されていない

☐ この国際調査機関が書換えたもの

4. 発明の名称は ☒ 出願人が提出したものを承認する。

☐ 次に示すように国際調査機関が作成した。

5. 要約は ☒ 出願人が提出したものを承認する。

☐ 第III欄に示されているように、法施行規則第47条(PCT規則38.2(b))の規定により国際調査機関が作成した。出願人は、この国際調査報告の発送の日から1カ月以内にこの国際調査機関に意見を提出することができる。

6. 要約書とともに公表される図は、
第 1 図とする。 ☒ 出願人が示したとおりである。

☐ なし

☐ 出願人は図を示さなかった。

☐ 本図は発明の特徴を一層よく表している。

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int. Cl⁸ A01N25/00, G06F17/00

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int. Cl⁸ A01N25/00, G06F17/00

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

CA (STN), REGISTRY (STN)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'A simulation of insecticides in indoor aerosol space spraying.', Chemosphere, 1993, Vol. 26, No. 6, p. 1167-1186.	1-24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'Indoor simulation of insecticides supplied with an electric vaporizer by the fugacity model.', Chemosphere, 1994, Vol. 28, No. 4, p. 767-786.	1-24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'An indoor simulation of the behavior of insecticides supplied by an electric vaporizer.', Chemosphere, 1994, Vol. 28, No. 3, p. 435-451.	1-24

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」先行文献ではあるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)

「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

16.01.98

国際調査報告の発送日

27.01.98

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/JP)

郵便番号100

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

唐木 以知良

4H

8018

電話番号 03-3581-1101 内線 3443

C (続き) 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'Indoor simulation of insecticides in broadcast spraying.', Chemosphere, 1995, Vol. 30, No. 2, p. 345-365.	1-24
A	BUKOWSKI, John A., et al., 'Simulated air levels of volatile organic compounds following different methods of indoor insecticide application.', Environmental science & technology, 1995, Vol. 29, No. 3, p. 673-676.	1-24
A	JP, 8-189909, A (松下電器産業株式会社) 23. 7月. 1996 (23. 07. 96) (ファミリーなし)	1-24
A	JP, 6-12398, A (インターナショナル・ビジネス・マシーンズ・コーポレーション) 21. 1月. 1994 (21. 01. 94) (ファミリーなし)	1-24

THIS PAGE BLANK (USPTO)

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int. Cl⁶ A01N25/00, G06F17/00

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int. Cl⁶ A01N25/00, G06F17/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CA (STN), REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'A simulation of insecticides in indoor aerosol space spraying.', Chemosphere, 1993, Vol. 26, No. 6, p. 1167-1186	1 - 24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'Indoor simulation of insecticides supplied with an electric vaporizer by the fugacity model.', Chemosphere, 1994, Vol. 28, No. 4, p. 767-786	1 - 24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'An indoor simulation of the behavior of insecticides supplied by an electric vaporizer.', Chemosphere, 1994, Vol. 28, No. 3, p. 435-451	1 - 24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'Indoor simulation of insecticides in broadcast spraying.', Chemosphere, 1995, Vol. 30, No. 2, p. 345-365	1 - 24



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

- "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
- "E" earlier document but published on or after the international filing date
- "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
- "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
- "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

January 16, 1998 (16. 01. 98)

Date of mailing of the international search report

January 27, 1998 (27. 01. 98)

Name and mailing address of the ISA/

Japanese Patent Office

Facsimile No.

Authorized officer

Telephone No.

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	BUKOWSKI, John A., et al., 'Simulated air levels of volatile organic compounds following different methods of indoor insecticide application.', Environmental science & technology, 1995, Vol. 29, No. 3, p. 673-676	1 - 24
A	JP, 8-189909, A (Matsushita Electric Industrial Co., Ltd.), July 23, 1996 (23. 07. 96) (Family: none)	1 - 24
A	JP, 6-12398, A (International Business Machines Corp.), January 21, 1994 (21. 01. 94) (Family: none)	1 - 24



(51) 国際特許分類6

A01N 25/00, G06F 17/00

A1

(11) 国際公開番号

WO98/19530

(43) 国際公開日

1998年5月14日(14.05.98)

(21) 国際出願番号

PCT/JP97/03924

(22) 国際出願日

1997年10月29日(29.10.97)

(30) 優先権データ

特願平8/294203	1996年11月6日(06.11.96)	JP
特願平8/295366	1996年11月7日(07.11.96)	JP
特願平8/299059	1996年11月11日(11.11.96)	JP
特願平8/299073	1996年11月11日(11.11.96)	JP

(71) 出願人 (米国を除くすべての指定国について)

住友化学工業株式会社

(SUMITOMO CHEMICAL COMPANY, LIMITED)[JP/JP]

〒541 大阪府大阪市中央区北浜四丁目5番33号 Osaka, (JP)

(72) 発明者; および

(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ)

的場好英(MATOBA, Yoshihide)[JP/JP]

〒565 大阪府吹田市上山田8-13-504 Osaka, (JP)

松尾昌幸(MATSUO, Masatoshi)[JP/JP]

〒665 兵庫県宝塚市中山五丁目4-12-5 Hyogo, (JP)

(74) 代理人

弁理士 長谷川芳樹, 外(HASEGAWA, Yoshiki et al.)

〒104 東京都中央区京橋二丁目13番10号

京橋ナショナルビル6F 創英国際特許事務所 Tokyo, (JP)

(81) 指定国 CA, US, 欧州特許 (AT, BE, CH, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE).

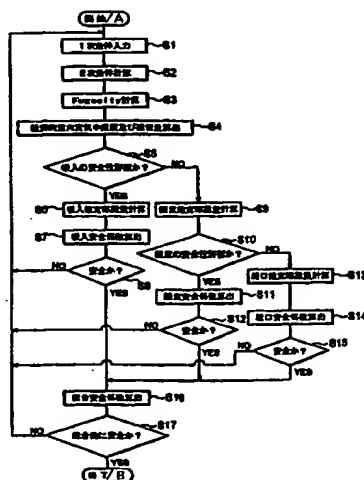
添付公開書類

国際調査報告書

(54) Title: **METHOD OF SIMULATING INDOOR BEHAVIOR OF ACTIVATED COMPOUND AGAINST HARMFUL ORGANISM**

(54) 発明の名称 有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法

A ... Start
B ... End
S1 ... Input primary conditions
S2 ... Calculate secondary conditions
S3 ... Calculate fugacity
S4 ... Calculate the concentration of a compound in the economical room air and the residual amount thereof
S5 ... Is the caution safety evaluated?
S6 ... Calculate estimated caution exposure amount
S7 ... Calculate caution safety coefficient
S8 ... Is the compound safe?
S9 ... Calculate estimated skin exposure amount
S10 ... Is the safety of skin exposure evaluated?
S11 ... Calculate the safety coefficient of skin exposure
S12 ... Is the skin exposure safe?
S13 ... Calculate estimated oral exposure amount
S14 ... Calculate the safety coefficient of oral exposure
S15 ... Is the oral exposure safe?
S16 ... Calculate the comprehensive safety coefficient
S17 ... Is the compound comprehensively safe?



(57) Abstract

A method of simulating the indoor behavior of an activated compound against a harmful organism, capable of processing a simultaneous differential equation, which is necessary for the simulation, accurately in a short period of time is provided, which also aims at evaluating the safety of a compound with respect to a human body. To achieve this object, this simulation method has the steps of dividing the indoor environment into predetermined media, establishing differential equations concerning the fugacity of the compound in each medium, determining the fugacity of the compound in each medium on the basis of the differential equations, simulating the indoor behavior of the compound on the basis of the fugacity of the compound in each medium, varying a micro-time unit, which is used when the differential equations are solved, in accordance with the fluctuation of the mass balance of the compound in a room, and evaluating the safety of the compound with respect to a human body on the basis of the indoor behavior of the compound.

THIS PAGE BLANK (USPTO)



(51) 国際特許分類6

A01N 25/00, G06F 17/00

A1

(11) 国際公開番号

WO98/19530

(43) 国際公開日

1998年5月14日(14.05.98)

(21) 国際出願番号

PCT/JP97/03924

(22) 国際出願日

1997年10月29日(29.10.97)

(30) 優先権データ

特願平8/294203

1996年11月6日(06.11.96)

JP

特願平8/295366

1996年11月7日(07.11.96)

JP

特願平8/299059

1996年11月11日(11.11.96)

JP

特願平8/299073

1996年11月11日(11.11.96)

JP

(71) 出願人 (米国を除くすべての指定国について)

住友化学工業株式会社

(SUMITOMO CHEMICAL COMPANY, LIMITED)[JP/JP]

〒541 大阪府大阪市中央区北浜四丁目5番33号 Osaka, (JP)

(72) 発明者 ; および

(75) 発明者 / 出願人 (米国についてのみ)

的場好英(MATOBA, Yoshihide)[JP/JP]

〒565 大阪府吹田市上山田8-13-504 Osaka, (JP)

松尾昌幸(MATSUO, Masatoshi)[JP/JP]

〒665 兵庫県宝塚市中山五月初4-12-5 Hyogo, (JP)

(74) 代理人

弁理士 長谷川芳樹, 外(HASEGAWA, Yoshiki et al.)

〒104 東京都中央区京橋二丁目13番10号

京橋ナショナルビル6F 創英国際特許事務所 Tokyo, (JP)

(81) 指定国 CA, US, 欧州特許 (AT, BE, CH, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE).

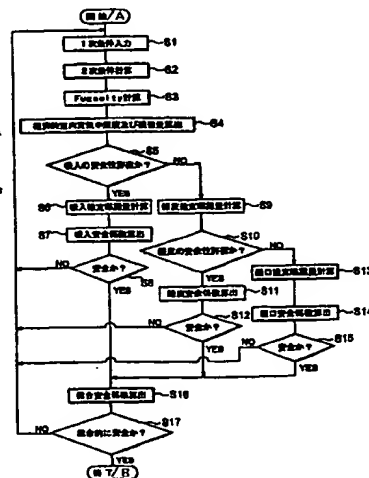
添付公開書類

国際調査報告書

(54) Title: METHOD OF SIMULATING INDOOR BEHAVIOR OF ACTIVATED COMPOUND AGAINST HARMFUL ORGANISM

(54) 発明の名称 有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法

A ... Start
B ... End
S1 ... Input primary conditions
S2 ... Calculate secondary conditions
S3 ... Calculate fugacity
S4 ... Calculate the concentration of a compound in the environmental room air and the residual amount thereof
S5 ... Is the suction safety evaluated?
S6 ... Calculate estimated suction exposure amount
S7 ... Calculate suction safety coefficient
S8 ... Is the compound safe?
S9 ... Calculate estimated skin exposure amount
S10 ... Is the safety of skin exposure evaluated?
S11 ... Calculate the safety coefficient of skin exposure
S12 ... Is the skin exposure safe?
S13 ... Calculate estimated oral exposure amount
S14 ... Calculate the safety coefficient of oral exposure
S15 ... Is the oral exposure safe?
S16 ... Calculate the comprehensive safety coefficient
S17 ... Is the compound comprehensively safe?



(57) Abstract

A method of simulating the indoor behavior of an activated compound against a harmful organism, capable of processing a simultaneous differential equation, which is necessary for the simulation, accurately in a short period of time is provided, which also aims at evaluating the safety of a compound with respect to a human body. To achieve this object, this simulation method has the steps of dividing the indoor environment into predetermined media, establishing differential equations concerning the fugacity of the compound in each medium, determining the fugacity of the compound in each medium on the basis of the differential equations, simulating the indoor behavior of the compound on the basis of the fugacity of the compound in each medium, varying a micro-time unit, which is used when the differential equations are solved, in accordance with the fluctuation of the mass balance of the compound in a room, and evaluating the safety of the compound with respect to a human body on the basis of the indoor behavior of the compound.

本発明は、有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法に関するものであり、シミュレーションに必要な連立微分方程式を短時間かつ正確に処理することが可能なシミュレーション方法を提供し、併せて化合物の人体に対する安全性を評価することを目的とする。

上記の目的を達成するために、本発明のシミュレーション方法は、室内環境を所定の媒体に分割し、各媒体における化合物の逸散度に関する微分方程式を立てる工程と、上記微分方程式から、各媒体における化合物の逸散度を求める工程と、各媒体における化合物の逸散度から、化合物の室内挙動を求める工程と、微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、室内における化合物のマスバランスの変動に応じて変化させる工程と、化合物の室内挙動に基づいて、化合物の人体に対する安全性を評価する工程を備えている。

PCTに基づいて公開される国際出願のパンフレット第一頁に掲載されたPCT加盟国を同定するために使用されるコード (参考情報)

AL	アルバニア	FI	フィンランド	LT	リトアニア	SN	セネガル
AM	アルメニア	FR	フランス	LV	ラトヴィア	SZ	スワジランド
AT	オーストリア	GB	イギリス	MC	モナコ	TD	チャド
AZ	アゼルバイジャン	GE	ジョージア	MD	モルドバ	TG	トーゴ
BA	ボスニア・ヘルツェゴビナ	GR	ギリシャ	MG	マダガスカル	TM	トルクメニスタン
BB	バハマ	GN	ギニア	MK	マケドニア共和国	TR	トルコ
BE	ベルギー	GW	ギニア・ビサウ	ML	マリ	TT	トリニダード・トバゴ
BF	ブルキナファソ	RU	ロシア	MN	モンゴル	UA	ウクライナ
BG	ブルガリア	UD	ウズベキスタン	MR	モーリタニア	UG	ウガンダ
BJ	ベナン	IE	アイルランド	MW	マラウイ	US	米国
BR	ブラジル	IL	イスラエル	MX	メキシコ	UY	ウルグエ
BY	ベラルーシ	IS	アイスランド	NE	ニジェール	VN	ベトナム
CA	カナダ	IT	イタリア	NL	オランダ	ZW	ジンバブエ
CF	中央アフリカ共和国	JP	日本	NO	ノルウェー		
CG	コンゴ	KE	ケニア	NZ	ニュージーランド		
CH	スイス	KR	韓国	PL	ポーランド		
CI	コートジボワール	KP	北朝鮮	PT	ポルトガル		
CM	カメルーン	RZ	ロシア連邦	RO	ルーマニア		
CN	中国	KZ	カザフスタン	RU	ロシア		
CU	キューバ	LC	セントルシア	SE	スウェーデン		
CY	キプロス	LI	リヒテンシュタイン	SG	シンガポール		
CZ	チェコ	LR	リベリア	SK	スロバキア		
DE	ドイツ	LS	レソト	SL	シエラレオネ		
DK	デンマーク						
EE	エストニア						
ES	スペイン						

明 細 書

5 有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法

技術分野

本発明は、有害生物防除活性化合物が含まれる薬剤を室内で使用する場合に、化合物の室内挙動を予測する予測方法及びそれを用いて人体に対する安全性を評価する安全性評価方法を含む、有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法に関するものであり、特に、有害生物防除活性化合物が含まれる薬剤を残留噴霧した場合、室内空間に噴霧した場合、加熱して揮散させた場合、床全域に噴霧した場合における、有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法に関するものである。

15

背景技術

従来から、地球環境における化学物質の振る舞いをシュミレートする逸散度（以下Fugacityと言う）モデルが知られている。上記Fugacityモデルは、化学物質がある媒体から他の媒体へ逃げようとする外力、即ち圧力を単位に持つFugacityを利用するものである。例えば化学物質濃度が2つの媒体A，Bで異なっているときに、各媒体における濃度は、

$$N_A/V_A = f_A Z_A$$

$$N_B/V_B = f_B Z_B$$

で表される。ここで、Nは化学的質量、Vは媒体の体積、fはFugacity、及びZは媒体のFugacity capacityである。

25

このとき、媒体A，B間の化学物質の移動(Transference)及び分解(Degradation)によって質量Nは時間と共に変化する一方、体積V及びFugacity capacity Zを一定と仮定したとき、上記2式は、

$$\begin{aligned}
 (df_A/dt) V_A Z_A &= dN_A/dt \\
 &= -(\text{Degradation})_A \pm (\text{Transference})_{AB} \\
 (df_B/dt) V_B Z_B &= dN_B/dt \\
 &= -(\text{Degradation})_B \pm (\text{Transference})_{AB}
 \end{aligned}$$

5 と表される。

この2つの微分方程式におけるDegradationとTransferenceとが与えられれば、未知のパラメータである f_A 、 f_B を計算で求めることができ、これらにFugacity capacity Z_A 、 Z_B を各々掛けることによって、各媒体における特定期間の化学物質濃度をシュミレートすることが可能となる。

10 化学物質の挙動をシミュレーションする装置として、特開昭64-88811号公報には、炭酸ガス等の特定ガス成分の温度変化を評価する場合に、実際に閉鎖空間を構成することなく、どんな容量の閉鎖空間にも対応してシミュレーションを行うことが可能な閉鎖空間疑似試験装置の構成が開示されている。

15 また、有害物質の人体に対する影響を評価する構成として、特開平3-89146号公報には、平行型セルよりも臨床状態に近い系である垂直型拡散セルを用いることによって、皮膚上の基剤からの薬剤の放出過程を光音響測定で、また、薬剤の皮膚浸透過程を吸光度法にて、同時にリアルタイムで測定することが可能な経皮吸収評価装置の構成が開示されている。

20 また、特開平7-218496号公報には、化学物質に固有に存在する溶解パラメータと上記化学物質の哺乳動物に対する半数致死量の対数値とが特定の相関関係にあることを用いて、化学物質の哺乳動物に対する急性毒性を予測するシステムの構成が開示されている。

25 さらに、殺虫剤を室内空間に噴霧した場合、電氣的に加熱して室内に揮散させた場合、床全面に噴霧した場合の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーションがそれぞれ、Y. Matoba et al. "A SIMULATION OF INSECTICIDES IN INDOOR AEROSOL SPACE SPRAYING" Chemosphere, Vol.26, No. 6, pp1167-1186, 1993、Y. Matoba et al. "INDOOR SIMULATION OF INSECTICIDES SUPPLIED WITH AN ELECTRIC VAPORIZER BY THE FUGACITY MODEL" Chemosphere, Vol.28, No.4, pp767-786, 1994、Y. Matob

a et al. "INDOOR SIMULATION OF INSECTICIDES IN BROADCAST SPRAYING" Chemosphere, Vol.30, No.2, pp345-365, 1995に記載されている。

5 発明の開示

しかしながら、上記シミュレーションモデルでは、微分方程式をどのように解くかは言及されておらず、微分方程式を解くときに設定される微小時間単位は一定値であると考えられる。理論的には、微小時間単位が小さければ計算時間が増大し、大きければ解が収束しなくなる。従って、経時的变化を伴うパラメータを含む微分方程式を解く場合に、解が発散しないように微小時間単位を一定値とすると、コンピュータの処理速度が増大するという問題を有している。

また、上記シミュレーションモデルでは、人体に対する安全性についての言及も何らなされていない。

15 本発明は、上記従来の問題点を解決するためになされたもので、その目的は、微小時間単位を自動的に設定することによって、連立微分方程式を短時間かつ正確に処理することが可能な有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法を提供することにある。

20 上記の目的を達成するために、本発明の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法は、室内環境を所定の媒体（構成要素）に分割し、該各媒体における前記化合物の逸散度に関する微分方程式を立てる工程と、前記微分方程式から、前記各媒体における前記化合物の逸散度を求める工程と、前記各媒体における前記化合物の逸散度から、前記化合物の室内挙動を求める工程と、前記微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、室内における化合物のマスバランスの変動に応じて変化させる工程とを備えている。

25 室内環境を所定の媒体に分割し、各媒体間の化合物のやり取り等を考慮することにより、実際の化合物の挙動に近いシミュレーション結果を得ることが可能になるとともに、経時的变化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に微小時間単位が設定することができ、コンピュータで上記微分方程式を処理する場合に、短時間で正確な解を得ることが

可能となる。

また、本発明の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法は、前記化合物の室内挙動に基づいて、前記化合物の人体に対する安全性を評価する工程をさらに備えていることが好適である。

- 5 上記構成により、短時間、かつ精度良く、有害生物防除活性化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となるので、上記化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く、目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

- 10 さらに、本発明の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法は、前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を残留噴霧することによって室内空間に導入され、前記媒体は、噴霧箇所、大きさに応じて1種以上に分けた浮遊粒子、室内空気、床、壁及び天井であってもよい。

- 15 この場合は、前記噴霧箇所における前記微分方程式は、該噴霧箇所における前記化合物の逸散度の時間変化と、該噴霧箇所の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該噴霧箇所への付着量と、該噴霧箇所と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該噴霧箇所における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化
- 20
- 25

合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

本発明の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法は、前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を空間噴霧することによって室内空間に導入され、前記媒体は、大きさに応じて1種以上に分けた浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井であってもよい。

この場合は、前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

本発明の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法は、前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を加熱揮散することによって室内空間に導入

され、前記媒体は、発生と消滅に応じて 1 種以上に分けた凝縮粒子、高濃度空気、中濃度空気、低濃度空気、床、壁、及び化合物濃度に応じて 1 種以上に分けた天井であってもよい。

5 この場合は、前記凝縮粒子における前記微分方程式は、該凝縮粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該凝縮粒子の体積の時間変化と、該凝縮粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該凝縮粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記高濃度空気における前記微分方程式は、該高濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の放出量と、該高濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該高濃度
10 空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記中濃度空気における前記微分方程式は、該中濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、該中濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該中濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記低濃度空気における前記微分方程式は、該低濃度空気における前記化合物
15 の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該低濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該低濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量
20 の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、該
25 天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

本発明の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法は、前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を床全体に噴霧することによって室内空間に導入され、前記媒体は、大きさに応じて分けた 1 種以上の浮遊粒子、室内空気、

床、壁、及び天井であってもよい。

この場合は、前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

また、本発明の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法は、前記床は、繊維の穂立ちを有する敷物で構成されており、前記媒体として、前記穂立ち間の空間をさらに加えてもよい。

この場合は、前記穂立ち間の空間における前記微分方程式は、該穂立ち間の空間における前記化合物の逸散度の時間変化と、該穂立ち間の空間における前記化合物を含む溶液の体積の時間変化と、前記化合物の該穂立ち間の空間部分への落下による付着量と、該穂立ち間の空間部分と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該穂立ち間の空間部分における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

床上に繊維の穂立ちを有する敷物を敷いている場合でも、媒体として穂立ち間

の空間をさらに加えることにより、正確に化合物の挙動をシミュレーションすることが可能となり、多様なシミュレーションが行うことができる。

上記の目的を達成するために、本発明のコンピュータプログラム製品は、外部からのデータ入力を受け付ける入力手段と、表示手段と、コンピュータ使用可能な記憶媒体から情報を読み出す読み出し手段とを備える情報処理装置とともに用いるためのコンピュータプログラム製品であって、プログラムを記憶するためのプログラム領域を有しており、かつ、前記入力手段から入力されたデータに基づいて、有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション結果を前記表示手段に表示させるための該記憶媒体中に具現化されたコンピュータ読みとり可能なプログラムを有しているコンピュータ使用可能な記憶媒体を前記コンピュータプログラム製品は備えており、該コンピュータプログラム製品は、前記プログラム領域において、室内環境を所定の媒体に分割し、該各媒体における前記化合物の逸散度に関する微分方程式を立てるプログラムと、前記微分方程式から、前記各媒体における前記化合物の逸散度を求めるプログラムと、前記各媒体における前記化合物の逸散度から、前記化合物の室内挙動を求めるプログラムと、前記微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、室内における化合物のマスバランスの変動に応じて変化させるプログラムとを備えている。

室内環境を所定の媒体に分割し、各媒体間の化合物のやり取り等を考慮することにより、実際の化合物の挙動に近いシミュレーション結果を得ることが可能になるとともに、経時的变化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に微小時間単位が設定することができ、コンピュータで上記微分方程式を処理する場合に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

また、前記コンピュータプログラム製品が、前記プログラム領域において、前記化合物の室内挙動に基づいて、前記化合物の人体に対する安全性を評価するプログラムをさらに備えていることが好適である。

上記構成により、短時間、かつ精度良く、有害生物防除活性化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となるので、上記化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、

安全性が高く、目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

本発明のコンピュータプログラム製品は、前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を残留噴霧することによって室内空間に導入され、前記媒体は、噴霧箇所、大きさに応じて1種以上に分けた浮遊粒子、室内空気、床、壁及び天井であってもよい。

この場合は、前記噴霧箇所における前記微分方程式は、該噴霧箇所における前記化合物の逸散度の時間変化と、該噴霧箇所の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該噴霧箇所への付着量と、該噴霧箇所と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該噴霧箇所における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

本発明のコンピュータプログラム製品は、前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を空間噴霧することによって室内空間に導入され、前記媒体は、大きさに応

じて1種以上に分けた浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井であってもよい。

この場合は、前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

本発明のコンピュータプログラム製品は、前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を加熱揮散することによって室内空間に導入され、前記媒体は、発生と消滅に応じて1種以上に分けた凝縮粒子、高濃度空気、中濃度空気、低濃度空気、床、壁、及び化合物濃度に応じて1種以上に分けた天井であってもよい。

この場合は、前記凝縮粒子における前記微分方程式は、該凝縮粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該凝縮粒子の体積の時間変化と、該凝縮粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該凝縮粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記高濃度空気における前記微分方程式は、該高濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の放出量と、該高濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該高濃度空

気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記中濃度空気における前記微分方程式は、該中濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、該中濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該中濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、
5 前記低濃度空気における前記微分方程式は、該低濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該低濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該低濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、該床と
10 他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記天井における前記微分方程式は、該天
15 井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

本発明のコンピュータプログラム製品は、前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を床全体に噴霧することによって室内空間に導入され、前記媒体は、大きさに
20 に応じて分けた1種以上の浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井であってもよい。

この場合は、前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解
25 量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化

と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

本発明のコンピュータプログラム製品は、前記床は、繊維の穂立ちを有する敷物で構成されており、前記媒体として、前記穂立ち間の空間をさらに加えてもよい。

この場合は、前記穂立ち間の空間における前記微分方程式は、該穂立ち間の空間における前記化合物の逸散度の時間変化と、該穂立ち間の空間における前記化合物を含む溶液の体積の時間変化と、前記化合物の該穂立ち間の空間部分への落下による付着量と、該穂立ち間の空間部分と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該穂立ち間の空間部分における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であることが好ましい。

床上に繊維の穂立ちを有する敷物を敷いている場合でも、媒体として穂立ち間の空間をさらに加えることにより、正確に化合物の挙動をシミュレーションすることが可能となり、多様なシミュレーションが行うことができる。

図面の簡単な説明

図 1 は、本発明の実施形態にかかる有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法を示すフローチャートである。

図 2 は、本発明の第 1 の実施形態において、化合物の室内挙動予測を行うときの室内環境のモデルを示す説明図である。

図 3 A は、室内空气中濃度の経時的変化を示すグラフである。

図 3 B は、図 3 A のグラフを用いて平均室内空気中濃度を求める場合の説明図である。

図 4 A は、残留量の経時的变化を示すグラフである。

図 4 B は、図 4 A のグラフを用いて平均残留量を求める場合の説明図である。

5 図 5 は、予測刻み時間幅の設定方法を示すフローチャートである。

図 6 A は、本発明の第 2 の実施形態にかかる有害生物防除活性化合物の室内挙動予測を行うときのカーベットのモデル化状態を示す説明図である。

図 6 B は、本発明の第 2 の実施形態にかかる有害生物防除活性化合物の室内挙動予測を行うときのカーベット繊維の拡大図である。

10 図 6 C は、本発明の第 2 の実施形態にかかる有害生物防除活性化合物の室内挙動予測を行うときのカーベットの空間部分の拡大図である。

図 7 は、上記第 1 の実施形態の Example 1 における空気中濃度の経時的变化を示すグラフである。

15 図 8 A は、Example 2 において、換気率を変えたときの空気中濃度の経時的变化を示すグラフである。

図 8 B は、Example 3 において、窓を開閉させたときの空気中濃度の経時的变化を示すグラフである。

図 9 A は、Example 1 において、床の残留量の経時的变化を示すグラフである。

20 図 9 B は、Example 1 において、壁及び天井の残留量の経時的变化を示すグラフである。

図 10 A は、Example 1 において、空気中濃度の実測値とシミュレーション結果とを比較したグラフである。

図 10 B は、Example 1 において、噴霧箇所、床、壁、及び天井の残留量の実測値とシミュレーション結果とを比較したグラフである。

25 図 11 は、本発明の第 3 の実施形態において、化合物の室内挙動予測を行うときの室内環境のモデル化状態を示す説明図である。

図 12 A は、Example 6～10 において、空気中濃度の実測値とシミュレーション結果とを比較したグラフである。

図 12 B は、Example 6～10 において、空気中濃度の実測値とシミュレーション結果とを比較したグラフである。

ン結果とを比較したグラフである。

図 1 2 C は、Example 6 において、床及び天井の残留量の実測値とシミュレーション結果とを比較したグラフである。

5 図 1 3 A は、本発明の第 4 の実施形態にかかる有害生物防除活性化合物の室内挙動予測を行うときのカーベットのモデル化状態を示す説明図である。

図 1 3 B は、本発明の第 4 の実施形態にかかる有害生物防除活性化合物の室内挙動予測を行うときのカーベット繊維の拡大図である。

図 1 3 C は、本発明の第 4 の実施形態にかかる有害生物防除活性化合物の室内挙動予測を行うときのカーベットの空間部分の拡大図である。

10 図 1 4 は、典型的な部屋のサイズ例を示すと共に、空気の流れを示す説明図である。

図 1 5 は、本発明の第 5 の実施形態において、化合物の室内挙動予測を行うときの室内環境のモデル化状態を示す説明図である。

15 図 1 6 A は、本発明の第 5 の実施形態において、化合物の室内挙動予測を行うときの室内環境のモデル化状態を示す説明図である。

図 1 6 B は、本発明の第 5 の実施形態における、電氣的加熱揮散器の拡大図である。

図 1 7 は、本発明の第 7 の実施形態において、化合物の室内挙動予測を行うときの室内環境のモデル化状態を示す説明図である。

20 図 1 8 は、粒子領域の落下状態を示す説明図である。

図 1 9 は、本発明の上記各実施形態に用いられる記憶媒体 2 0 の構成図である。

図 2 0 は、記憶媒体 2 0 に記憶されたプログラムを動作させるための情報処理装置の構成図である。

25 図 2 1 は、記憶媒体 2 0 に記憶されたプログラムを動作させるための情報処理装置の構成図である。

発明を実施するための最良の形態

(1) 第 1 の実施形態

本発明の第 1 の実施形態について図面に基づいて説明すれば、以下の通りであ

る。

本実施形態にかかる殺虫剤等の薬剤（溶液）に含まれる有害生物防除活性化合物（以下、単に化合物と称する）の室内挙動シミュレーション方法では、例えばゴキブリ等の室内の害虫を駆除するために薬剤を残留噴霧した場合の化合物の振る舞いを予測するものである。ここで、残留噴霧とは、床と壁との境等という局所的な部位に、薬剤を噴霧する処理法のことを言う。尚、上記薬剤は、ピレスロイド系殺虫性化合物、有機リン系化合物、カーバメイト系化合物、及び昆虫成長抑制剤（IGR）を含むすべての殺虫剤等である。

まず、環境を、図2に示すように、噴霧箇所1、大粒子（浮遊粒子）2、小粒子（浮遊粒子）3、室内全体の空気4、床5、壁6、及び天井7の7種の媒体に分類する。

床5と壁6との境に薬剤を噴霧すると、噴霧箇所1に薬剤が付着すると共に、残りは空気中に大・小粒子2・3として飛散する。上記噴霧箇所1に付着した薬剤はその箇所に浸透するだけでなく、蒸発する。一方、大・小粒子2・3については、その重さのため大粒子2よりも小粒子3の方が上方に飛散し、これらの粒子が床5・壁6・天井7の内装材上に付着したとき、粒子中の化合物は内装材にしみ込んだ後空気4中に移動するか、もしくは光・酸化によって分解する。このような大・小粒子2・3や蒸発した薬剤は部屋の換気によって減少している。

上記7種の媒体における化合物のFugacityに関する連立微分方程式を立て、これをルンゲクッタ法を用いて解くことによって、薬剤を残留噴霧した際の薬剤中の化合物の室内挙動、即ち室内における化合物分布、及び噴霧箇所1、床5、壁6、あるいは天井7への付着量の経時的変化を予測解析する。

このとき、床5の種類としては、主に畳、フローリング、及びカーペット（敷物）の3種があるので、床種類に応じた微分方程式を立てることとする。本実施形態では、床5をフローリングとした場合について説明する。

図1に基づいて、上記化合物の室内挙動シミュレーション方法を説明する。本実施形態にかかるシミュレーション方法は、大きくは、室内環境を所定の媒体に分割し、各媒体における化合物の逸散度に関する微分方程式を立てる工程（S1～S2）と、上記微分方程式から、各媒体における化合物の逸散度を求める工程

(S 3) と、各媒体における化合物の逸散度から、化合物の室内挙動を求める工程 (S 4) と、微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、室内における化合物のマスバランスの変動に応じて変化させる工程 (S 2 1 ~ S 3 5、図 5 参照) と、化合物の室内挙動に基づいて、化合物の人体に対する安全性を評価する工程 (S 5 ~ S 1 7) に分割できる。

まず、ステップ (以下、S と略称する) 1 で 1 次条件を入力する。この 1 次条件は、化合物の物理化学的性質 (表 1 参照)、化合物の室内環境挙動性質 (表 2 参照)、室内環境 (表 3 参照)、及び製品の性質 (表 4 参照) である。

表 1

化合物の物理化学的性質	記号	数値例
分子量	—	350.46 [g/mole]
比重	ρ	1.11 [g/cm ³]
蒸気圧	PS	1.60×10^{-4} [Pa]
水溶解度	CS	6.28×10^{-3} [mole/m ³]
オクタノール／水配分係数	K _{OW}	7.59×10^4

表 2

化合物の室内 環境挙動性質	記号	数値例
分解半減期		
in 噴霧箇所	τ_1	13 [day]
粒子	τ_i (i=2,3)	7.7 [h]
空気	τ_4	7.7 [h]
床	τ_5	13 [day] (フローリングの場合)
壁・天井	τ_j (j=6,7)	31 [day] (壁紙の場合)

表 3

室内環境		記号	数値例
オイルベース	部屋の大きさ	V_4	23.3 [m ³]
	温度	T	298 [K] (=25 [°C])
	相対湿度	ϕ	60 [%RH]
	絶対湿度	H	1.19×10^{-2} [kg-H ₂ O/kg-dry air]
	換気率	G	1.58 [1/h]
	粒子構成溶媒の室内蒸気圧	P_{∞}	0 [Pa]
	空気拡散係数	D_{air}	8.64×10^{-2} [m ² /h]
	オイル成分の含有率	—	0.04 (フローリングの場合) 0.46 (畳の場合) 0.3 (壁紙の場合)
水ベース	湿球温度	T_d	292.5 [K]
	水の蒸気圧	P_{∞}	1.89×10^3 [Pa]

但し、 $V_4 = L_4 \times W_4 \times \text{高さ}$ (=3.6m×2.7m×2.4m)である。

表 4

製品の性質		記号	数値例
オイルベース	化合物含有量	C_a	6.74×10^3 [g/m ³]
	化合物放出量	A_a	8.19×10^{-4} [mole]
	粒子構成溶媒放出量	O_a	4.26×10^{-5} [m ³]
	粒子構成溶媒の性質	蒸気圧	P_d 2.72 [Pa]
		分子量	M_d 184.37 [g/mole]
		比重	ρ_d 7.56×10^{-6} [g/m ³]
	噴霧箇所への付着割合	—	60 [%]
	浮遊粒子の直径(2種)	d_{02}	20 [μ m]
		d_{03}	5 [μ m]
	浮遊粒子の分布(2種)	—	30 [%] (大粒子)
		—	10 [%] (小粒子)
	噴霧箇所の面積	A_t	$(3.6+2.7) \times 0.1 \times 4$ [m ²]
水ベース	粒子構成溶媒の性質	蒸気圧	P_d 2.26×10^3 [Pa]
		分子量	M_d 18 [g/mole]
		比重	ρ_d 1×10^6 [g/m ³]

次に、上記 1 次条件を用いて 2 次条件を計算で求める (S 2)。この 2 次条件には、1 次条件のみで求まり、時間的に変化しない一義的要因条件 (表 5 参照) と、時間的な変化を伴う経時的変化条件 (表 6 参照) とがある。これらの計算は後で詳細に説明する。

表 5

一義的要因条件	記号
浮遊粒子の蒸発定数	α
製品中の化合物の体積割合	R_a
空気中の化合物の拡散係数	D_{ca}
床・壁・天井の表面積	$A_j (j=5,6,7)$
床・壁・天井の拡散係数	D_c
浮遊粒子が噴霧箇所へ落下する割合	γ_1
浮遊粒子が床・壁・天井に付着する割合	$\gamma_j (j=5,6,7)$
Fugacity capacity of 噴霧箇所	Z_1
浮遊粒子	$Z_i (i=2,3)$
空気	Z_4
床・壁・天井	$Z_j (j=5,6,7)$
分解定数 of 噴霧箇所	K_1
浮遊粒子	$K_i (i=2,3)$
空気	K_4
床	K_5
壁・天井	$K_j (j=6,7)$

ここで、表 1 の数値例に基づく拡散係数の数値例は
 $1.36 \times 10^{-11} \text{ [m}^2/\text{h}]$ である。

表 6

経時的変化条件	記号
浮遊粒子の直径	d_i ($i=2,3$)
落下速度	v_i ($i=2,3$)
浮遊数	n_i ($i=2,3$)
浮遊高さ	H_i ($i=2,3$)
化合物の移動速度	
in 噴霧箇所	k_1
浮遊粒子	k_i ($i=2,3$)
空気	k_4
床・壁・天井	k_j ($j=5,6,7$)
噴霧箇所と空気との間の 化合物の移動係数	D_{14}
浮遊粒子と空気との間の 化合物の移動係数	D_{i4} ($i=2,3$)
空気と床・壁・天井との間の 化合物の移動係数	D_{4j} ($j=5,6,7$)
噴霧箇所の体積	V_1
浮遊粒子の体積	V_i ($i=2,3$)
床・壁・天井の体積	V_j ($j=5,6,7$)

上記2次条件を用いて7種のFugacityを計算する(S3)。即ち、噴霧箇所1、大・小粒子2・3、空気4、床5、壁6、及び天井7に関する7種の微分方程式を連立し、これをルンゲクッタ法で解き、7種のFugacityを経時的に算出する。ここで、微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅(微小時間単位)は、化合物のマスバランスの変動に合わせて自動的に可変して設定されるようになっている。

S4で、上記算出された小粒子3及び空気4のFugacity(f_3, f_4)、必要に応じて大粒子2のFugacity(f_2)を用いて化合物の経時的室内空气中濃度を算出し、噴霧箇所1及び床5のFugacity(f_1, f_5)を用いて化合物の噴霧箇所1及び床5への経時的な残留量を算出する。

S5で、薬剤を吸入した場合における安全性評価を行うか否かを判断し、吸入における安全性評価を行う場合には、上記経時的室内空气中濃度を用いて、汚染された空気を吸入することによって、どの程度曝露されるかを示す吸入推定曝露量を計算する(S6)。その後、吸入推定曝露量に基づいて吸入安全係数を算出する(S7)。S8で、国毎に定められた基準値と上記吸入安全係数とを比較し、基準値に対して吸入安全係数が上回れば「安全性に問題なし」との判断を下す。一方、S8で基準値に対して吸入安全係数が下回れば、「安全性に問題あり」との判断を下し、S1へ戻って例えば、化合物の変更、製剤処方の変更、あるいは使用条件の変更等の1次条件の変更を検討する。

また、上記S5で吸入における安全性評価でない場合には、薬剤が付着した噴霧箇所1や床5に接触することによって皮膚がどの程度曝露されるかを示す経皮推定曝露量を計算する(S9)。その後、S10で経皮における安全性評価を行うか否かを判断し、経皮における安全性評価を行う場合には、上記経皮推定曝露量に基づいて経皮安全係数を算出する(S11)。S12で、吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経皮安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S12で安全性に問題がある場合にはS1に戻って1次条件の変更を検討する。

また、上記S10で経皮における安全性評価でない場合には、上記経皮推定曝露量に基づいて、手等に付着した薬剤が口から入ることによってどの程度曝露さ

れるかを示す経口推定曝露量を計算し（S 1 3）、続いて、この経口推定曝露量に基づいて経口安全係数を算出する（S 1 4）。この経口曝露は、特に幼児が薬剤の付着した手を口に入れることによって起こる可能性がある。S 1 5で吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経口安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S 1 5で安全性に問題がある場合にはS 1に戻って1次条件の変更を検討する。

最後に、S 8、S 1 2、あるいはS 1 5において、安全であると判断された場合には総合的な安全性の評価を行う。ここでは、先に求められた吸入安全係数、経皮安全係数、及び経口安全係数の各々の逆数の和を求めて、得られた値を逆数にすることにより、総合安全係数を求める（S 1 6）。この総合安全係数を基準値と比較することによって、先の安全性評価と同様の評価を行う（S 1 7）。

次に、上記S 2～S 4、S 6、S 7、S 9、S 1 1、S 1 3、及びS 1 4の工程について詳細に説明する。

(i) 2次条件計算（S 2）

上記表 5 に示した一義的要因条件、及び表 6 に示した経時的変化条件の計算を説明する。

大・小粒子 2・3 の蒸発定数（ α ）は、粒子の表面温度（ T_d ）、粒子構成溶媒の性質（蒸気圧 P_d 、分子量 M_d 、比重 ρ_d ）、及び室内環境（空気拡散係数 D_{air} 、蒸気圧 P_∞ 、室温 T_∞ ）より、以下のように定義される。但し、 R は気体定数である。

$$\alpha = \frac{4D_{air}M_d}{R\rho_d} \left(\frac{P_d}{T_d} - \frac{P_\infty}{T_\infty} \right) \quad \dots(1)$$

尚、上記表 3 及び表 4 の上部は残留噴霧エアゾールがオイルベースの場合を例示し、この場合には T_∞ （粒子から遠く離れた箇所の温度）や T_d は室温（ T ）とし、 P_∞ （粒子から遠く離れた箇所のオイルの蒸気圧）はゼロとする。

また、残留噴霧エアゾールが水ベースの場合には、式（1）の P_d 、 M_d 、 ρ_d 、 T_d 、及び P_∞ は水の性質に基づく値に変更する必要がある。具体的には、室温（ T ）が 298〔K〕（＝25℃）、相対湿度が 60〔%RH〕時の上記要因値を表 3 及び表 4 の下部に例示している。

尚、 T_d は室温（ T ）及び絶対湿度（ H ）に基づき、化学機械の理論と計算（第2版）（亀井三郎編、産業図書）等に記載される「質量基準湿度表」から求めることができる。また、 P_d と P_∞ は、以下の式より算出可能である。

$$\log_{10} P_d = 10.23 - 1750 / (T_d - 38)$$

$$5 \quad \log_{10} P_\infty = 8.23 - 1750 / (T - 38) + \log_{10} \psi$$

ここで、 ψ は室内の相対湿度である。

噴霧箇所1のFugacity capacity (Z_1)は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow}) より、及び噴霧箇所1を構成する床あるいは壁のオイル成分の含有率 (ρ_1) より、

$$10 \quad Z_1 = \rho_1 K_{ow} C^s / P^s \quad \dots(2)$$

と表される。

大・小粒子2・3のFugacity capacity ($Z_i, i=2,3$)は、化合物の蒸気圧 (P^s)、及び粒子の表面温度 (T_d) より、

$$Z_i = \frac{6 \times 10^6}{P_L^s RT_d} \quad \dots(3)$$

$$P_L^s = P^s \exp\{6.79(T_M/T_d - 1)\}$$

15 と表される。ここでは、液体状態の化合物の蒸気圧 (P_L^s) を有害物質の融点 T_M と、 T_d を用いて算出しているが、 T_M が得られない場合、 P_L^s は固体状態の化合物の蒸気圧 (P^s) と同じとしてよい。

空気4のFugacity capacity (Z_4)は、室温 (T) より、次のように表される。

$$20 \quad Z_4 = \frac{1}{RT} \quad \dots(4)$$

床5、壁6、及び天井7のFugacity capacity ($Z_j, j=5,6,7$)は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow})、及び床5、壁6、及び天井7を構成する材質の粒子構成溶媒成分含有率 ($\rho_j, j=5,6,7$) より、

$$25 \quad Z_j = \rho_j K_{ow} C^s / P^s \quad \dots(5)$$

と表される。

大・小粒子 2・3 が床 5・壁 6・天井 7 に付着する割合 (γ_j) は、安全性評価の観点から床 5 に 100% 付着するとしてもよいが、過去の実測値から、例えば、床：壁：天井 = 97：2：1 にしてもよい。

大・小粒子 2・3 が噴霧箇所 1 に落下する割合 (γ_1) は、上記割合 (γ_j)、及び部屋の大きさ (V_4) に対する噴霧箇所 1 の占有面積 (A_1) より求まる。

床 5・壁 6・天井 7 中の化合物の拡散係数 (D_c) は、以下のようにして算出可能である。即ち、 D_c は空気中の化合物の拡散係数 (D_{c_a}) に 10^{-9} を乗じて求めることが可能であり、 D_{c_a} は化合物の性質 (構造式、分子量等) から例えば、Wike and Lee Method (Handbook of Chemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill Book Company, 1982) に従って、算出可能である。

7 種の媒体中では主に光・酸化分解反応が生じており、噴霧箇所 1 の分解定数 (K_1)、大・小粒子 2・3 の分解定数 ($K_i, i=2,3$)、空気 4 の分解定数 (K_4)、床 5 の分解定数 (K_5)、及び壁 6・天井 7 の分解定数 ($K_j, j=6,7$) は、分解半減期 (τ_1)、(τ_i)、(τ_4)、(τ_5)、あるいは (τ_j) を用いて、

$$\left. \begin{aligned} K_1 &= 0.693/\tau_1 \\ K_i &= 0.693/\tau_i \\ K_4 &= 0.693/\tau_4 \\ K_5 &= 0.693/\tau_5 \\ K_j &= 0.693/\tau_j \end{aligned} \right\} \quad \dots(6)$$

と定義される。このとき、上記表 2 に示すような分解半減期の内、空気中の化合物の分解半減期 (τ_4) は実測が難しいので、分解定数 (K_4) を決定するのは容易でないことが多い。そこで、実測値が入手できない場合、化合物の構造式を用いて、Atmospheric Oxidation program (Atkinson et al., 1984, Chem. Rev. Vol.84, pp437-470) で算出し求める方法もある。また、粒子中並びに内装材 (床 5・壁 6・天井 7) 中の分解定数については、実測値が入手できない場合、居住者の安全性を見込みゼロとすることも可能である。

時間 t での大・小粒子 2・3 の直径 ($d_i, i=2,3$) は、粒子の体積が粒子構成溶媒成分の蒸発により時間と共に小さくなるので、粒子構成溶媒成分が蒸発して

いる間については、噴霧直後 ($t = 0$) の粒子の直径 (d_{0i} , $i=2,3$)、及び式 (1) より求まる蒸発定数 (α) を用いて、以下の式 (7) の通りとなる。

$$d_i = \sqrt{d_{0i}^2 - 2\alpha t} \quad \dots(7)$$

$$d_i = \sqrt[3]{R_a} d_{0i} \quad \dots(7')$$

5 一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の直径 (d_i) は、製品中の化合物の体積割合 (R_a) と噴霧直後の粒子の直径 (d_{0i}) とを用いて、上記の式 (7') の通りとなる。

製品中の化合物の体積割合 (R_a) は、化合物含有量 (C_a) 及び化合物の比重 (ρ) より、 C_a / ρ として表される。

10 粒子構成溶媒成分が蒸発し終わるまでの大・小粒子 2・3 の落下速度 (v_i , $i=2,3$) は、粒子の動きが重力と空気抵抗に支配されているので、粒子構成溶媒の比重 (ρ_d)、及び式 (7) より求まる粒子の直径 (d_i) を用いて、ストークスの法則より以下の式 (8) となる。

$$v_i = \frac{\rho_d g S_c}{18\eta} d_i^2 = \beta (d_{0i}^2 - 2\alpha t) \quad \dots(8)$$

$$S_c = 1 + \frac{2}{7.6 \times 10^7 d_i} \{6.32 + 2.01 \exp(-8.322 \times 10^6 d_i)\} \quad \dots(8')$$

$$v_i = (\rho / \rho_d) \beta d_i^2 \quad \dots(8'')$$

15 但し、 g は重力加速度、 η は空気 4 の粘性率、 S_c はすべり補正係数、及び β は速度係数である。ここで、すべり補正係数 (S_c) は、粒子が小さくなるとストークスの法則に従わなくなるので、これを補正するための係数であり、式 (7) より求まる粒子の直径 (d_i) により上記の式 (8') で示される。

20 一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の落下速度 (v_i) は、化合物の比重 (ρ)、粒子構成溶媒の比重 (ρ_d)、速度係数 (β)、及び式 (7') より求まる粒子の直径 (d_i) により、上記に示す式 (8'') と表される。

大・小粒子 2・3 の浮遊数 (n_i , $i=2,3$) は、後述の空気 4 中の化合物の移動速度 (k_4)、粒子の浮遊高さ (H_i)、部屋の大きさ ($V_4 = L_4 \times W_4 \times \text{高さ}$)、及び式 (8) あるいは式 (8'') で求まる粒子の落下速度 (v_i) より、

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{n_i}{H_i} v_i - \frac{n_i}{L_4} k_4 \quad \dots(9)$$

と表される。ここで、粒子の浮遊高さ (H_i) は、薬剤を噴霧箇所 1 に噴霧したときに噴霧箇所 1 で反射し浮遊した後の粒子分布の床 5 からの最高高さを意味し、粒子が細かいほど高い所に位置することになる。

- 5 噴霧箇所 1 中の化合物の移動速度 (k_1) は、床 5・壁 6・天井 7 中の化合物の拡散係数 (D_c) を用いて、 $(D_c/t)^{0.5}$ と表される。

大・小粒子 2・3 中の化合物の移動速度 ($k_i, i=2,3$) は、次に示す空気 4 中の化合物の移動速度 (k_4) より、 $k_4/100$ として表される。

- 10 空気 4 中の化合物の移動速度 (k_4) は、換気率 (G) より、 GV_4/A_4 として示される。ここで、上記 A_4 は、空気 4 の移動方向 (図 2 中の矢印方向) に対する部屋の断面積のことである。

床 5・壁 6・天井 7 中の化合物の移動速度 ($k_j, j=5,6,7$) は、床 5・壁 6・天井 7 中の化合物の拡散係数 (D_c) を用いて $(D_c/t)^{0.5}$ と表される。

- 15 噴霧箇所 1 と空気 4 との間の化合物の移動係数 (D_{14}) は、噴霧箇所 1 中の化合物の移動係数 (k_1)、空気 4 中の化合物の移動速度 (k_4)、噴霧箇所 1 の面積 (A_t)、式 (8) または (8') により求まる粒子の落下速度 (v_i)、式 (2) より求まる噴霧箇所 1 の Fugacity capacity (Z_1)、及び式 (4) より求まる空気 4 の Fugacity capacity (Z_4) より、以下のようになる。

$$D_{14} = \frac{1}{1/(k_1 A_t Z_1) + 1/(k_4 A_t Z_4)} \quad \dots(10)$$

- 20 大・小粒子 2・3 と空気 4 との間の化合物の移動係数 ($D_{i4}, i=2,3$) は、大・小粒子 2・3 中の化合物の移動速度 (k_i)、空気 4 中の化合物の移動速度 (k_4)、式 (7) あるいは式 (7') より求まる粒子の直径 (d_i)、式 (3) で求まる粒子の Fugacity capacity (Z_i)、及び式 (4) より求まる空気 4 の Fugacity capacity (Z_4) より、次のようになる。ここで、 $A_i (= \pi d_i^2)$ は粒子の表面積である。
- 25

$$D_{i4} = \frac{1}{1/(k_i A_i Z_i) + 1/[(k_4 + v_i) A_i Z_4]} \quad \dots(11)$$

空気4と、床5・壁6・天井7と間の化合物の移動係数 (D_{4j} , $j=5,6,7$)は、
 空気4中の化合物の移動速度 (k_4)、床5・壁6・天井7中の化合物の移動速
 度 (k_j)、床5・壁6・天井7の表面積 (A_j)、式(4)より求まる空気4
 のFugacity capacity (Z_4)、及び式(5)より求まる床5・壁6・天井7
 のFugacity capacity (Z_j)より、

$$D_{4j} = \frac{1}{1/(k_4 A_j Z_4) + 1/(k_j A_j Z_j)} \quad \dots(12)$$

となる。尚、床5、壁6、及び天井7の表面積 (A_j) は、それぞれ部屋の大き
 さ ($V_4 = L_4 \times W_4 \times \text{高さ}$) と噴霧箇所1の面積 (A_t) より求められる。

噴霧箇所1の体積 (V_1) は、床5・壁6・天井7中の拡散係数 (D_e) より
 求まる。

大・小粒子2・3の体積変化 (dV_i / dt) は、式(7)あるいは式
 (7')より求まる浮遊粒子の直径 (d_i)、及び式(1)より求まる蒸発定数
 (α)を用いて、

$$\frac{dV_i}{dt} = -\frac{\pi}{2} \alpha d_i \quad \dots(13)$$

と表される。つまり、大・小粒子2・3は、粒子中のオイル成分あるいは水分が
 時間と共に蒸発して、その体積 (V_i , $i=2,3$) が減少する。

床5・壁6・天井7の体積 (V_j , $j=5,6,7$) は、薬剤が残留噴霧される前の床
 5、壁6、及び天井7をそれぞれ薄い膜状のものと考え、薬剤がそれらの膜にし
 み込むにつれてその厚みが増して体積が増加するものと考え、上記床5・壁
 6・天井7の表面積 (A_j)、及び床5・壁6・天井7中の化合物の拡散係数
 (D_e)より、次のように示される。

$$V_j = 2\sqrt{D_e t} A_j \quad \dots(14)$$

(ii) Fugacity計算 (S3)

噴霧箇所1での化合物の振る舞いは、Fugacity (f_1) に関する微分方程式
 として、

$$\begin{aligned}
 \frac{df_1}{dt} V_1 Z_1 &= -\sqrt{D_c/t} A_1 Z_1 f_1 && V - change \\
 F - change &+ \gamma_1 \sum_{i=2}^3 n_i V_i Z_i f_i && Deposition(i) \quad \dots(15) \\
 &- D_{14}(f_1 - f_4) && Transference(1) \\
 &- K_1 V_1 Z_1 f_1 && Degradation
 \end{aligned}$$

と表される。ここで、*v-change*の項は噴霧箇所1の体積変化（時間と共に増加）を、*Deposition(i)*の項は大・小粒子2・3の落下に伴う付着を、*Transference(1)*の項は噴霧箇所1と空気4との間における化合物の移動量を、*Degradation*の項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

大・小粒子2・3中の化合物の振る舞いは、*Fugacity* ($f_i, i=2,3$)に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned}
 \frac{df_i}{dt} V_i Z_i &= \frac{\pi}{2} \alpha d_i Z_i f_i && V - change \\
 F - change &- D_{14}(f_1 - f_4) && Transference(1) \quad \dots(16) \\
 &- D_{i4}(f_i - f_4) && Transference(4) \\
 &- K_i V_i Z_i f_i && Degradation
 \end{aligned}$$

と表される。ここで、*v-change*の項は大・小粒子2・3の体積変化（時間と共に減少）を、*Transference(1)*の項は噴霧箇所1と空気4との間の化合物の移動量を、*Transference(4)*の項は大・小粒子2・3と空気4との間の化合物の移動量を、*Degradation*の項は化合物の光分解量の変化を各々表している。

空気4中の化合物の振る舞いは、*Fugacity* (f_4)に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned}
 \frac{df_4}{dt} V_4 Z_4 &= -GV_4 Z_4 f_4 && Ventilation \\
 F - change &- D_{14}(f_4 - f_1) && Transference(1) \\
 &- \sum_{i=2}^3 n_i D_{i4}(f_4 - f_i) && Transference(i) \quad \dots(17) \\
 &- \sum_{j=5}^7 D_{4j}(f_4 - f_j) && Transference(j) \\
 &- K_4 V_4 Z_4 f_4 && Degradation
 \end{aligned}$$

と表される。ここで、*ventilation*の項は化合物の室内からの排出量を、*Transference(1)*の項は空気4と噴霧箇所1との間の化合物の移動量を、*Transference(i)*の項は空気4と大・小粒子2・3との間の化合物の移動量を、*Trans*

ference(j)の項は空気4と床5・壁6・天井7との間の化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

床5・壁6・天井7中の化合物の振る舞いは、Fugacity ($f_j, j=5, 6, 7$) に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned}
 \frac{df_j}{dt} V_j Z_j &= -\sqrt{D_c/t} A_j Z_j f_j && V - change \\
 5 \quad F - change &+ \gamma_j \sum_{i=2}^3 n_i V_i Z_i f && Deposition(i) \quad \dots(18) \\
 &- D_{4j} (f_j - f_4) && Transference(4) \\
 &- K_j V_j Z_j f_j && Degradation
 \end{aligned}$$

と表される。ここで、V-changeの項は床5・壁6・天井7の体積変化（時間と共に増加）を、Deposition(i)の項は大・小粒子2・3の落下に伴う付着を、Transference(4)の項は床5・壁6・天井7と空気4との間の化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化を示している。

10 上記式(15)ないし(18)の7種の微分方程式を連立してルンゲクッタジ
ル法にて解くことにより、Fugacity ($f_1 \sim f_7$) を算出する。

この連立微分方程式を解くときに、微小時間単位である予測刻み時間幅 (dt) を設定する必要がある。つまり、予測刻み時間幅は、まず時間 (t_0) での連立微分方程式の解を求め、次に予測刻み時間幅を加えた ($t_0 + dt$) 時間での微分方程式の解を求めることであり、予測刻み時間幅を次々と加えながら解を得ることによって経時的に変化するFugacityが求められる。理論的には、上記
15 予測刻み時間幅の設定時間が小さければ小さいほど正確な解を得ることができるが、計算時間が非常に長くなる。逆に、設定時間が大き過ぎると解が発散して、解に誤りが生じ易くなる。

20 そこで、本願発明では、非常に大きな変化が薬剤に起こるときには予測刻み時間幅が小さく設定されるように、逆に大きな変化がない場合には予測刻み時間幅が大きく設定されるようにしている。

具体的には、薬剤の投入量と得られた解とが合致するように常にマスバランスを確認し、マスバランスが大きく変動しない場合には予測刻み時間幅を大きく、
25 マスバランスが変動し始める場合には予測刻み時間幅を小さくする。例えば、マ

スバランスの変動を±5%の精度に設定すると、

$$\text{化合物投入量} / (\text{存在量} + \text{分解量} + \text{排出量}) = 0.95 \sim 1.05$$

の関係が常に満たされるように、即ちマスバランスの変動が±5%の範囲内に納まるように予測刻み時間幅を絶えず設定する。

- 5 ここで、上記化合物投入量は、化合物放出量 (A_a) のことである。また、存在量は、連立微分方程式で7種の媒体中の経時的な化合物量が求められるので、それらを合計して以下のように算出する。分解量及び排出量も以下に示す通りである。

$$\left. \begin{aligned} \text{存在量} &= V_1 Z_1 f_1 + \sum_{i=2}^3 n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 f_k V_k Z_k \\ \text{分解量} &= K_1 V_1 Z_1 f_1 + \sum_{i=2}^3 K_i n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 K_k f_k V_k Z_k \\ \text{排出量} &= G V_4 Z_4 f_4 + \sum_{i=2}^3 G n_i V_i Z_i f_i \end{aligned} \right\} \quad \dots(19)$$

- 10 図5のフローチャートに基づいて、この予測刻み時間幅 (dt) の設定方法を説明する。

- まず、予測刻み時間幅 (dt) の初期値を入力し (S21)、次にマスバランスの差の上限である上限設定値 (例えば0.1 [%])、及びマスバランスの差の下限である下限設定値 (例えば 10^{-6} [%]) を入力する (S22)。その後、
- 15 $t = t_0$ のFugacity及びマスバランスを計算し (S23・S24)、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のFugacity及びマスバランスを計算する (S25・S26)。

- マスバランスの変動が±5%の範囲内であるかどうかを確認し (S27)、マスバランスの変動が±5%の範囲内であれば、 $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のマスバランスとの差が上限設定値以上であるか否かを判断する (S28)。S28で上限設定値以上であれば、予測刻み時間幅 (dt) を小さくした方が解が正確になるので、予測刻み時間幅 (dt) を1/2倍して設定を変更し (S29)、S28で上限設定値より小さければS30で $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のマスバランスとの差が下限設定値以下であるか否かを判断す
- 20
- 25

る。

5 S 3 0 でマスバランスの差が下限設定値以下であれば、予測刻み時間幅 (dt) を大きくしても解には影響を及ぼさないので、予測刻み時間幅 (dt) を 2 倍して設定を変更し (S 3 1)、次に、S 3 1 で変更した予測刻み時間幅 (dt) が予測刻み時間幅 (dt) の最大値 (例えば、0.1 [hour]) 以下であるか否かを判断する (S 3 2)。S 3 2 で予測刻み時間幅 (dt) が最大値以下の場合には、解は発散しないので、S 3 1 で設定した予測刻み時間幅 (dt) を用いる。一方、S 3 2 で予測刻み時間幅 (dt) が最大値より大きい場合には解が発散する可能性があるので、予測刻み時間幅 (dt) を最大値に設定し直す (S 3 3)。また、上記 S 3 0 において、マスバランスの差が下限設定値よりも大きければ、即ち下限設定値と上限設定値との間にあれば予測刻み時間幅 (dt) は変更せずに計算を続ける。

上記 S 2 9、S 3 0、S 3 2、あるいは S 3 3 の工程を経ると、S 2 5 へ戻って再び計算を行い、目的の時間に達するまで上記工程を繰り返す。

15 一方、S 2 7 において、マスバランスの変動が $\pm 5\%$ の範囲を越えると、マスバランスの変動が大きいため、変動が $\pm 5\%$ の範囲内の場合と比較して予測刻み時間幅 (dt) を小さくして計算を行った方がよい。従って、一旦計算を中止し (S 3 4)、下限設定値を小さく設定し直してから (S 3 5)、S 2 3 の工程へ戻る。

20 このように、予測刻み時間幅を一定値にすることなく、マスバランスの変動をチェックしながら予測刻み時間幅を可変設定することにより、正確に、かつ効率よく Fugacity を算出することが可能となる。

(iii) 経時的室内空气中濃度及び残留量算出 (S 4)

25 化合物の経時的室内空气中濃度は、上記 (ii) 項目で求められた空气の Fugacity (f_4) に Fugacity capacity (Z_4) を掛けたものと、小粒子の Fugacity (f_3) に Fugacity capacity (Z_3) を掛けたものとを足し合わせることにによって算出される。尚、薬剤の種類によっては大粒子が人体に吸入される恐れがあるものがあるが、その場合には大・小の粒子の Fugacity (f_2) (f_3) を用いて計算すればよい。

化合物の残留量は、噴霧箇所 1 の Fugacity (f_1) に Fugacity capacity (Z_1) を掛けたものと、床 5 の Fugacity (f_5) に Fugacity capacity (Z_5) を掛けたものとを足し合わせるによって算出される。尚、噴霧箇所 1 が皮膚に接する恐れがほとんどない場合には床 5 のみの Fugacity (f_5) を用いて計算すればよい。

(iv) 吸入推定曝露量及び吸入安全係数計算 (S 6・S 7)

前述した経時的室内空気中濃度は、例えば図 3 A に示すような曲線を描く。この濃度曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積濃度を求め (図 3 B 参照)、この値から平均室内空気中濃度を算出する。尚、上記特定期間は目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

次に、上記平均室内空気中濃度、呼吸量、及び曝露時間に基づいて、吸入推定曝露量を求める。即ち、

吸入推定曝露量 [mg/kg/day] = 平均室内空気中濃度 [mg/m³] ×

呼吸量 [m³/kg/min] × 曝露時間 [min/day]

の計算を行う。ここで、上記呼吸量は文献値あるいは実測値を用いればよい。また、大人と子供とに呼吸量を分けて考慮すれば、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。また、吸入された有害物質が体内に全て吸収されず、呼吸によって一部排出される場合は、吸入比率を考慮することにより、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。

吸入安全係数は、予め動物実験により調べられた吸入毒性に関する無影響量と、先に求められた吸入推定曝露量とから算出される。即ち、

吸入安全係数 =

吸入無影響量 [mg/kg/day] / 吸入推定曝露量 [mg/kg/day]

で表される。

(v) 経皮推定曝露量及び経皮安全係数計算 (S 9・S 11)

前述の残留量は、例えば図 4 A に示すような曲線を描く。この残留量曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積残留量を求め (図 4 B 参照)、この値から平均残留量を算出する。尚、上記特定期間は、目的に応じて任

意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

次に、平均残留量、皮膚付着率、接触面積、及び体重に基づいて、経皮推定曝露量を求める。即ち、

$$\begin{aligned} 5 \quad \text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} = & (\text{平均残留量 [mg/m}^2\text{]} \times \\ & \text{皮膚付着率 [\%]} \times \text{接触面積 [m}^2\text{/day]}) / \text{体重 [kg]} \end{aligned}$$

の計算を行う。ここで、上記接触面積は文献値（例えば、4 [m²/day]）を用いればよい。また、皮膚付着率は化合物の存在する床に皮膚が接触した場合に、化合物が皮膚に付着する割合のことであり、この値は文献値あるいはモデル実験値を用いればよい。

10

上記皮膚付着率のモデル実験方法は、次の通りである。幼児が床に接する圧力と同様の圧力で、デニムの布（8cm×10cm）の上に重し（8cm×8cm×8cm；4.2 kg）を載せ、幼児が動くような速さ（120cm/15sec）でデニムの布を床上で引っ張る。このデニムと床を分析することにより、デニム及び床に含有される化合物を算出し、その比から皮膚付着率を求める。尚、この方法で得た皮膚付着率は、実際に手を床に押し付けて、手と床の分析値から求めた皮膚付着率と同等か、あるいは若干高めであることが確認されており、居住者の曝露評価を行う上でこのモデル実験方法は有用であることが確認された。

15

次に、経皮安全係数は、予め動物実験により調べられた経皮毒性に関する無影響量と、先に求められた経皮推定曝露量とから算出される。即ち、

20

経皮安全係数＝

$$\text{経皮無影響量 [mg/kg/day]} / \text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]}$$

で表される。

しかしながら、一般に経皮無影響量はあまり求められておらず、文献値も多くない。従って、経皮安全係数を、経皮推定曝露量と、文献値が多数存在する経口無影響量及び経皮吸収率を用いて、以下の式に基づいて求める方がより正確な値を求めることができる。

25

$$\begin{aligned} \text{経皮安全係数} = & \text{経口無影響量 [mg/kg/day]} / \\ & (\text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} \times \text{経皮吸収率 [\%]}) \end{aligned}$$

ここで、経皮吸収率が不明の場合には、通常、国別のガイドライン（例えば 10 %）があり、これを用いればよい。

(vi) 経口推定曝露量及び経口安全係数計算 (S 1 3・S 1 4)

上記 (v) 項目で得られた経皮推定曝露量、手表面積比、及び口移行率に基づいて、手から口への経口推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{経口推定曝露量 [mg/kg/day]} = \text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} \times \text{手表面積比 [\%]} \times \text{口移行率 [\%]}$$

の計算を行う。ここで、上記手表面積比は（手表面積／体表面積）で表され、その値は文献値（例えば、5 [%]）を用いればよい。また、口移行率は仮定値であり、例えば 100 % とする。

また、残留噴霧された化合物によって汚染された食器や食品によって経口曝露することが考えられる場合は、上記の手から口への経口推定曝露量に、食器あるいは食品から口への経口推定曝露量を加えたものを経口推定曝露量とする必要がある。例えば食器からの経口推定曝露量は、食器内に有害物質が残留する量を示す食器残留量、食器の表面積の総和である食器使用面積、食器からの口移行率に基づいて、

$$\text{経口推定曝露量 [mg/kg/day]} = \text{食器残留量 [mg/m}^2\text{]} \times \text{食器使用面積 [m}^2\text{/day]} \times \text{口移行率 [\%]} / \text{体重 [kg]}$$

の計算をすることによって得られる。ここで、食器残留量は、（平均床残留量 × 食器汚染率）で表され、この食器汚染率の値は実測値（例えば 9 %）又は仮定値を用いればよい。

次に、経口安全係数は、予め動物実験により調べられた経口毒性に関する無影響量と、先に求められた経口推定曝露量とから算出される。即ち、

経口安全係数 =

$$\text{経口無影響量 [mg/kg/day]} / \text{経口推定曝露量 [mg/kg/day]}$$

で表される。

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、まず環境を、噴霧箇所 1 と、大・小粒子 2・3 と、室内全体の空気 4、床 5 と、壁 6 と、天井 7 とに分け、これらにおける化合物の Fugacity に関する微

分方程式を連立して解くことによって、上記化合物を含む薬剤を残留噴霧したときの上記化合物の室内挙動を予測するものである。

これにより、環境を7種の媒体と見なし、各媒体間の化合物のやり取り等を考慮しているので、実際の化合物の挙動に近いシミュレーション結果を得ることが可能となる。

また、連立微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅は、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、残留噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変して設定される。

従って、連立微分方程式を解くときに、化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように残留噴霧後の化合物のマスバランスが常にチェックされて予測刻み時間幅が可変するので、マスバランスの変動が小さいときには上記予測刻み時間幅が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると予測刻み時間幅が小さく設定されることとなる。つまり、経時的変化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に予測刻み

時間幅が設定される。これにより、コンピュータで処理する際に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

また、本実施形態における有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、上記予測結果を用いて、薬剤を残留噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価するものである。

従って、短時間、かつ精度良く、化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

尚、本実施形態では、床5の種類をフローリングとしたが、畳の場合も上記と同様の微分方程式を立てればよい。但し、式(5)の床5のFugacity capacity (Z_5)を求める際に、粒子構成溶媒成分含有率(表3参照)をフローリングから畳のものに変更する必要がある。また、式(6)の床5の分解定数(K_5)を求める際に、分解半減期をフローリングから畳のものに変更する必要がある。

また、本実施形態では、ルンゲクッタジル法を用いてFugacityを求めたが、

他の方法を用いて微分方程式を解くこともできる。しかしながら、ルンゲクッタ
ジル法を用いると、上述した微分方程式のプログラムをBasicで容易に組むこと
ができるので望ましい。また、ルンゲクッタジル法以外で微分方程式を解く際
にも、前述のように、予測刻み時間幅を設定することにより、同様の効果を得るこ
5 ことが可能である。

次に上記有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性
評価方法の実施例 (Example 1~5) について図面に基づいて説明すれば、以下
の通りである。

本実施例における化合物の室内挙動シミュレーション方法の評価は、予測に
10 よって得られた結果と、実際の化合物の室内挙動を測定して得られた実測値とを
比較することによって行われた。

まず、実際の化合物の室内挙動の測定について説明する。

使用されたエアゾール缶 (300 [ml]) は、0.9 [g] のd-phenothrin
(フェノスリン) (商標名; スミスリン, $C_{23}H_{26}O_3$: (3-フェノキシフェ
15 ニル) メチル (1R) -シス-トランス-2, 2-ジメチル-3- (2-メチル
-1-プロフェニル) シクロプロパンカルボキシレート) と、1.1 [g] のd-tet
ramethrin (テトラメスリン) (商標名; ネオピナミンフォルテ, $C_{19}H_{25}O_4$
4: (1, 3, 4, 5, 6, 7-ヘキサヒドロ-1, 3-ジオキソ-2H-イソ
インドール-2-イル) メチル (1R) -シス-トランス-2, 2-ジメチル-
20 3- (2-メチル-1-プロフェニル) シクロプロパンカルボキシレート) とを
含有している。

また、室内環境は、日本における典型的なアパートの6畳間 (9.72 [m²])
とした。上記エアゾール缶の表示にしたがって、床や壁より20 [cm] ほど離れた
25 距離から60 [sec/m²] の割合で噴霧した。噴霧箇所は、床と壁との境から床
方向に幅10 [cm] または15 [cm]、上記境から壁方向に幅10 [cm] または15
[cm] であった (図2 参照)。全噴霧期間は、10 [cm] 幅の領域では2.52 [m
2] につき2.5分間、15 [cm] 幅の領域では3.78 [m²] につき3.7分間であっ
た。

部屋の条件を表7に示すように変えて、5種の測定を行った。即ち、連続使用

した場合 (Example 1)、換気率を変化させた場合 (Example 2)、窓を開けた場合 (Example 3)、及びエアコンディショナー (以下、エアコンと称する) を作動させた場合 (Example 4) の測定と、皮膚付着率のための測定 (Example 5) とを行った。

表 7

	Example 1	Example 2	Example 3	Example 4	Example 5
測定箇所	空気、床、 壁、天井	空気	空気	空気	床、手、 デニムの布
噴霧期間 [min/day]	2.5min/2weeks ×4回	3.7	2.5	2.5	2.5
エアコンの状態	OFF	OFF	OFF	ON	OFF
室温 [°C]	25	25	25	25	25
湿度 [%RH]	60	50	60	60	62
窓の状態	Closed	Closed	5min-open or 2h-open	Closed	Closed
照明条件	人工光と自然光	なし	基本的になし	なし	なし
照度 [lux]	1320	0		0	0
換気率 [h ⁻¹]	1.58	0.50 or 1.58 or 4.14	1.86, 10.6	1.56	1.54

Example 1では、噴霧は2週間に1度の割合で4回行われた。エアコンは作動させず、部屋の窓は閉めた状態とした。室温は25〔℃〕、湿度は60〔%〕に制御した。照明条件は、朝7時から10時までと夜6時から11時までとの間は人工光で室内を照らすと共に、2つの窓を通じて自然光を与えた。換気率は、日本人女性と幼児が居住するのに最低限必要な1.5〔h⁻¹〕に設定された。このような条件下において実測した部屋の温度、湿度、照度、及び換気率は表7に示す通りであり、これらの値は測定中の平均値である。この温度、湿度、及び照度の測定は部屋の中央にて行われた。また、換気率は、測定前と後とに確認を行っている。

Example 2では、照明条件は自然光をカットし、暗所とした。換気率は、窓を閉めた日本のアパートの実際の換気率が0.5～3〔h⁻¹〕であるので、0.5～4〔h⁻¹〕に変えて測定を行った。

Example 3では、噴霧を行った直後に、エアゾール缶の表示にしたがって5分間もしくは2時間窓を開放した。照明条件は、基本的には暗所としたが（表7において照度0〔lux〕）、窓を開けているときには自然光が入射した（表7において平均照度1890〔lux〕）。

上記各測定におけるサンプリング処理は、次のようにして行われた。

Example 1～4では、噴霧してから特定期間後に室内空気をサンプリングした。このとき、d-phenothrin及びd-tetramethrinは、幼児と大人の呼吸領域に対応する位置で、直径が30〔μm〕以下の粒子が捕集できるよう空気吸引量を調節して気体状態のみならず浮遊粒子状態の化合物をもサンプリングした。

Example 1において、噴霧前に床・壁・天井の中央に、それらと同じ材質の5〔cm〕×5〔cm〕片を置いておくことによって、床・壁・天井のサンプリングが行われた。壁に関しては、空気の流入側、排出側、及びそれら以外の横側の3箇所をサンプリングした。

空気をサンプリングした捕集管、フローリング片、壁紙片、天井片、手、及びデニムの布におけるd-phenothrin及びd-tetramethrinは、表8に示す方法で分析された。これらの方法は、BHT（2，6-ジ-tert-ブチル-p-クレゾール）を含む有機溶剤の抽出液を用い、必要ならばクリーンアップを行って、

- ガスクロマトグラフィー（GC）に備えつけられた質量分析計（MSD）で分析を行うものである。各プロセスでは、溶剤の蒸発に伴う化合物の揮散を防止するためにジエチレングリコールやオクタノールが加えられる。d-phenothrin（質量183〔m/z〕）とd-tetramethrin（質量164〔m/z〕）共に、次に示す
- 5 GC条件下で9分で検出された。装置は島津GC-MS QP-1100EX (Mode EI, 70eV) を使用し、205〔°C〕から10〔°C/min〕の割合で上昇するようにプログラムされたDC-608カラム（内径0.53〔mm〕，長さ30〔m〕，厚さ0.8〔μm〕）で、注入及びイオンソース温度は260〔°C〕であった。

表 8

媒 体	抽出液	クリーンアップ		回収率 [%]		検出限界
		d-phenothrin	d-tetramethrin	d-phenothrin	d-tetramethrin	
捕集管	ヘキサン /アセトン	なし	なし	103	107	0.05 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]
床	ジクロロメタン		FL	92.7	78.3	8 [$\mu\text{g}/\text{m}^2$]
壁	ヘキサン	GPC MBE-FL	MBE-FL	93.2	89.8	8 [$\mu\text{g}/\text{m}^2$]
天井						
手	2 - プロパノール	MBE-NH ₂	SI	87.7	92.8	0.05 [$\mu\text{g}/\text{hand}$]
デニムの布	ヘキサン	MBE-FL		92.8	103	8 [$\mu\text{g}/\text{m}^2$]

注) MBE : メガボンドエルト、FL : フロリジル、SI : シリカゲル、GPC : ゲル浸透カラム

上記の方法で測定したd-phenothrin及びd-tetramethrinの空气中濃度と床・壁・天井の残留量との結果について説明する。

空气中濃度に関して、Example 1では、2週間に1度(2.5分間)の割合で8週間に渡って噴霧した時間を含んで、125日間測定された。図7に示すように、空气中濃度は噴霧直後に最高値を示し、d-phenothrinに関しては床の中心から25〔cm〕と120〔cm〕の高さでの平均が752〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕、d-tetramethrinに関しては1040〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕であり、その後急速に減少した。このとき、空气中での化合物の半減期が両方とも20分程度で短いため、噴霧期間である8週間の間に4度のピークを有する形となった。また、噴霧期間後の空气中濃度は、両者とも0.10〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕よりも少なかった。さらに、床上25〔cm〕と120〔cm〕の高さとは、濃度にほとんど差はなかった。また、噴霧の回数の増加に伴う空气中濃度の増加は見られなかった。尚、図7において、検出限界(0.05〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕)未満で測定不可能であった濃度に関しては、検出限界でプロットしている。

8週間で放出された全噴霧量は、1.11〔g〕のd-phenothrin及び1.38〔g〕のd-tetramethrinを含む250〔g〕であり、これは300〔ml〕のエアゾール缶1.2本分に等しい。残留噴霧用の300〔ml〕のエアゾール缶は日本で年間500万本売られているので、一件当たりに使用される年間消費量は0.13本と計算される。これにより、測定で使用した噴霧量(1部屋につき1.3本)は、実際の年間消費量よりもかなり多いことがわかる。

表9に示すように、噴霧期間中の平均空气中濃度、及び8週間の噴霧期間を含む年間の平均空气中濃度は、d-phenothrinが2.35〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕/0.43〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕、d-tetramethrinが3.25〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕/0.53〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕と計算される。これにより、d-tetramethrinに対するd-phenothrinの空气中での存在量は、エアゾール缶内での存在比に対応していることがわかる。尚、表9では、検出限界値未満のものについては検出限界値を用いて平均空气中濃度を計算している。

表 9

化合物	期間	空气中濃度 〔 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 〕		残留量 〔 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ 〕		
		25 [cm]	120 [cm]	床	壁	天井
d-phenothrin	噴霧期間	2.35	2.35	2200	33	27
	年間	0.41	0.45	360	7	9
d-tetramethrin	噴霧期間	3.31	3.19	2500	43	34
	年間	0.54	0.52	400	15	30

Example 2において、換気率を変えて噴霧後3.7分経ってからのd-phenothrin及びd-tetramethrinの空气中濃度を測定した。図8 Aにはd-phenothrinの結果のみを示す。これにより、換気率 $1.58 \text{ [h}^{-1}\text{]}$ での空气中での半減期は21分、換気率 $0.50 \text{ [h}^{-1}\text{]}$ では58分、換気率 $4.14 \text{ [h}^{-1}\text{]}$ では11分であることがわかった。

Example 3において、2.5分間薬剤を噴霧した直後に窓を開けてd-phenothrin及びd-tetramethrinの空气中濃度を測定した。図8 Bにd-phenothrinの結果を示す。これによれば、窓を5分間開放した場合の半減期は14分、2時間の場合では4分、窓を閉めたままでは20分であることがわかった。また、窓を開けた状態での平均濃度（5分開けた場合で $2.88 \text{ [}\mu\text{g/m}^3\text{]}$ 、2時間開けた場合で $1.19 \text{ [}\mu\text{g/m}^3\text{]}$ ）は、開けてない状態（ $14.8 \text{ [}\mu\text{g/m}^3\text{]}$ ）の $1/5$ 未満であった。

尚、図8 A及び図8 Bの測定値は、床から25 [cm] と120 [cm] の高さでサンプリングした空氣の濃度の平均値である。また、検出限界未満で測定不可能な場合には検出限界値（ $0.05 \text{ [}\mu\text{g/m}^3\text{]}$ ）としてプロットしている。

上記の半減期についてまとめたものを表10に示す。この結果、残留噴霧では、部屋の換気、特に噴霧直後に窓を開けることが、空气中濃度に非常に影響を及ぼすことがわかった。尚、表10には参考として薬剤を空間に噴霧したときの化合物（d-resmethrin及びd-tetramethrin）の空气中での半減期を記している。

表10

測定	換気率 or 窓の状態	残留噴霧の半減期 [min]		空間噴霧の半減期 [min]	
		d-phenoethrin	d-tetramethrin	d-resmethrin	d-tetramethrin
Example 1	1.58 [h ⁻¹]	20	20	16	23
Example 2	0.50 [h ⁻¹]	58	58	—	49
	1.58 [h ⁻¹]	21	22	—	19
	4.14 [h ⁻¹]	11	11	—	8
Example 3	5 min open	14	14	9	12
	2 h open	4	4	4	3

ところで、例えば、Example 3のように窓を開けた状態では、光分解による半減期を推定すると、化合物の構造から前述のAtmospheric Oxidation programからd-phenothrinで2.1時間、d-tetramethrinで1.7時間であると考えられている。従って、表10に示すように、空気中での半減期は上記光分解による半減期よりも短いため、d-phenothrin及びd-tetramethrinの濃度減少は、主に光分解ではなく換気によって引き起こされ则认为られる。

Example 4において、エアコンを使用した場合の平均濃度（d-phenothrinが11.6 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]、d-tetramethrinが15.5 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]）と、使用しない場合の平均濃度（d-phenothrinが14.8 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]、d-tetramethrinが20.2 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]）とを比較すると、ほとんど同じであった。これにより、空気の対流とエアコンのフィルタへの薬剤の吸収が空気中濃度に及ぼす影響はほとんど無視できることがわかった。

床・壁・天井の残留量に関して、Example 1で床・壁・天井における125日間の残留量を測定した結果を図9 A、図9 B及び上記表9に示す。尚、図9 B及び表9における壁の残留量の値は、空気の流入側及び排出側での値と、それらの横側での値を平均したものであり、図9 Bの壁・天井の残留量は、壁と天井の残留量を平均した値をプロットしている。

空気の流入出によって、流入側での壁の残留量（d-phenothrinが28 [$\mu\text{g}/\text{m}^2$]、d-tetramethrinが35 [$\mu\text{g}/\text{m}^2$]）は、排出側や横側での壁の残留量（排出側で45 [$\mu\text{g}/\text{m}^2$]と58 [$\mu\text{g}/\text{m}^2$]、横側で33 [$\mu\text{g}/\text{m}^2$]と43 [$\mu\text{g}/\text{m}^2$]）よりも少なかった。また、d-phenothrin及びd-tetramethrinの残留量は噴霧回数が増すにつれて増大するが、噴霧後には徐々に減少した。このときのd-phenothrin及びd-tetramethrinの床での半減期はそれぞれ13日、20日、壁・天井での半減期は各々31～41日、24～75日であった。これらの値は、上述の空気中での半減期よりも長くなっているが、それは床・壁・天井の素材に酸化防止剤が大量に含まれているからである。また、薬剤を噴霧した箇所を除いて、床残留量が壁や天井の残留量よりも多くなっているのは、浮遊粒子が床に付着するからである。

Example 5では、化合物が残留する床に直接手を押さえつける手付着試験と、

手の代わりにデニムの布を用いた拭き取り試験とを行うことによって、フローリングにおけるd-phenothrin及びd-tetramethrinの皮膚付着率が測定された。スチューデントのt検定 ($P \leq 0.05$) を行ったところ、拭き取り試験によって得られた皮膚付着率（噴霧6時間後でd-phenothrinが0.31 [%] , d-tetramethrinが0.33 [%]、噴霧24時間後でそれぞれ0.17 [%] , 0.09 [%]）は、手付着試験によって得られた結果（噴霧6時間後でそれぞれ0.22 [%] , 0.32 [%]、噴霧24時間後でそれぞれ0.06 [%] , 0.07 [%]）と同等か、もしくはそれよりも高かった。これにより、拭き取り試験のみで皮膚付着率を決定しても、経皮曝露の安全性を推定する際に十分であることがわかった。

- 10 次に、本願発明の化合物の室内挙動予測方法に基づいて得られたシミュレーション結果について説明する。このときの条件は、上記Example 1と同じ条件とした。また、1次条件としては、第1の実施形態の表1ないし表4に記載された数値を入力した。

- 15 噴霧2.5分後から24時間後までの間のd-phenothrinの残留噴霧による振る舞いをシュミレートしたところ、表11に示す結果が得られた。尚、表中の“浮遊期間”は、2.4[m]より低い位置に浮遊している粒子が床上に落ちるか、空气中で消滅するまでの期間のことであり、“移動量”は、全噴霧量に対して24時間以内に移動した化合物量の割合のことである。

表11

挙動	FROM	TO	割合
直径の変化 of 大粒子 小粒子	20 [μm] 5 [μm]	3.6 [μm] 0.9 [μm]	(35秒間の変化) (2.2秒間の変化)
浮遊期間 of 大粒子 小粒子	0 [h] 0 [h]	2.0 [h] 30 [h]	
移動量	空気(粒子含) 空気(粒子含) 空気(粒子含) 空気(粒子含) 噴霧箇所 床 壁 天井	噴霧箇所 床 壁 天井 空気 空気 空気 空気	1.0 [%] 7.0 [%] 0.44 [%] 0.10 [%] 0.16 [%] 0.15 [%] 0.0011 [%] 0.00023 [%]
換気量	室内	室外	29 [%]
分解量 in 噴霧箇所 空気(粒子含) 床 壁 天井			1.7 [%] 3.2 [%] 0.35 [%] 0.0080 [%] 0.0018 [%]
残留量 in 噴霧箇所 空気(粒子含) 床 壁 天井			58 [%] 0.00060 [%] 6.5 [%] 0.42 [%] 0.10 [%]

これによれば、大粒子(直径20〔 μm 〕)中の主な溶剤は35秒後に完全に蒸発し、2時間後に空気中から消滅した。また、小粒子(直径5〔 μm 〕)中の主な溶剤は2.2秒後に完全に蒸発し、30時間空気中に存在した。粒子を含む空気中の薬剤(噴霧直後の薬剤量の40〔%〕)は、24時間以内に噴霧箇所へ1.0〔%〕、
5 床に7.0〔%〕、壁に0.44〔%〕、天井に0.10〔%〕分布し、残りの29〔%〕は室外へ、3.2〔%〕は空気中で分解された。噴霧箇所における薬剤(噴霧直後の薬剤量の60〔%〕)は、24時間以内に噴霧量の0.16〔%〕が空気中へ蒸発し、1.7〔%〕は光・酸化分解し、残りの58〔%〕は噴霧箇所へ残留した。

上記空気中濃度と噴霧箇所及び床・壁・天井の残留量とに関するシミュレーション結果と、前述の実測値とを比較したところ、図10A及び図10Bに示す通りとなった。図において、実線はシミュレーション結果を示し、プロットは実測値を示している。このときの実測値はExample 1の結果から導き出したものである。

これにより、本願発明の化合物の室内挙動予測方法に基づく予測結果は、実測
15 値に非常に近いことがわかる。即ち、残留噴霧すると、空気中の大部分の薬剤は、室外に排出されるか、または床に落下する。噴霧箇所の薬剤は床や壁中に浸透し、わずかに分解あるいは蒸発した。

次に、本願発明の化合物の安全性評価方法に基づいて得られた結果について説明する。ここでは、8週間に4回(1回につき2.5分間噴霧)、床と壁との境に
20 薬剤を残留噴霧したときの、幼児を含む居住者に対するd-phenothrin及びd-tetramethrinの室内曝露量を評価した。

居住者は、空気中に存在するd-phenothrin及びd-tetramethrinの蒸気あるいは粒子を吸入する。ヒトは直径8〔 μm 〕以下のエアゾール粒子を肺まで吸入するので、上述のように30〔 μm 〕以下の粒子と蒸気薬剤とをサンプリングす
25 れば、吸入曝露の評価にとっては十分である。

上記第1の実施形態の(iv)項で説明したように、平均室内空気中濃度(表9の“噴霧期間”参照)と、呼吸量と、曝露時間とを用いて計算した吸入推定曝露量を以下の表12に示す。ここで、日本人の室内での平均呼吸量は、大人が0.220〔L/min/kg〕、幼児が0.235〔L/min/kg〕である。また、曝露時間は、

噴霧後24時間部屋に閉じ込められた最悪の場合を考えて、24 [h/day] と仮定した。

表12

化合物	対象	吸入(窓閉)	吸入(窓開)	経皮	経口
d-phenothrin	幼児	0.795	0.159	2.71	0.135
	大人	0.744	0.149	0.553	—
d-tetramethrin	幼児	1.12	0.224	2.15	0.107
	大人	1.01	0.202	0.438	—

尚、表において、“窓閉”とは上記曝露時間中窓を閉めた場合であり、“窓開”とは窓を閉めた状態で噴霧を行い、その後5分間窓を開けた場合(Example 3)である。

また、表12には、上記第1の実施形態の(v)項で説明したように、床の平均残留量(表9の“噴霧期間”参照)、皮膚付着率、接触面積、及び体重を用いて計算した経皮推定曝露量を示している。このとき、幼児と大人に対する接触面積を4.0[m²/day]、幼児の体重を10.2[kg]、大人の体重を50[kg]とした。また、d-phenothrin及びd-tetramethrinのフローリングでの皮膚付着率は、前述のExample 5の測定値の積分と外挿とから評価した値を用いた。即ち、皮膚付着率はd-phenothrinが0.31[%]、d-tetramethrinが0.25[%]であり、経皮推定曝露量の計算にはこれらの値が用いられた。

さらに、表12には、上記第1の実施形態の(vi)項で説明したように、経皮推定曝露量、手表面積比、及び口移行率を用いて計算した経口推定曝露量を示している。このとき、手表面積比を約5[%]とし、口移行率を最悪の場合の100[%]と仮定し、幼児のみの経口推定曝露量が計算された。

上記の計算で求められた吸入推定曝露量、経皮推定曝露量、及び経口推定曝露量に基づいて得られる吸入安全係数、経皮安全係数、並びに口安全係数をまとめたものを表13に示す。同時に、上記3つの安全係数より求められる総合安全係数も表中に記している。また、d-phenothrinの安全係数(吸入、経皮、あるいは経口)及びd-tetramethrinの安全係数(吸入、経皮、あるいは経口)の各々の逆数の和を求めて、得られた値を逆数にすることによって算出されるd-phenothrinとd-tetramethrinとの両方に対する安全係数も表中に示している。

表13

化合物対象	吸入(窓閉)	吸入(窓開)	経皮	経口	総合(窓閉)	総合(窓開)
d-phenothrin 幼児 大人	23,100	116,000	369,000	923,000	21,300	80,400
	24,700	124,000	1,810,000	—	24,400	116,000
d-tetramethrin 幼児 大人	2,880	14,400	465,000	100,000	2,780	12,200
	3,190	15,900	2,280,000	—	3,180	15,800
両方 幼児 大人	2,560	12,800	206,000	90,300	2,460	10,600
	2,820	14,100	1,010,000	—	2,820	13,900

尚、d-phenothrinに関するラットの無影響量は、吸入が18.4 [mg/kg/day] (=無影響気中濃度210 [mg/m³] ×ラットの呼吸量0.365 [L/min/kg] ×ラットの曝露時間4 [h/day] ; 週6日曝露で4週間の試験)、経皮が1000 [mg/kg/day] (21日間の試験)、経口が125 [mg/kg/day] (6か月間の試験)であった。また、d-tetramethrinに関するラットの無影響量は、吸入が3.22 [mg/kg/day] (=無影響気中濃度49 [mg/m³] ×ラットの呼吸量0.365 [L/min/kg] ×ラットの曝露時間3 [h/day] ; 週7日曝露で4週間の試験)、経皮が1000 [mg/kg/day] (21日間の試験)、経口が10.75 [mg/kg/day] (6か月間の試験)であった。

この結果、幼児の安全係数は、大人のそれよりも低いことが確認されると共に、経皮安全係数を除いて、d-phenothrinの安全係数の方がd-tetramethrinの安全係数よりも高いことがわかった。また、3つ内で吸入安全係数が最も低いので、3種の曝露ルートの中で曝されたときには吸入安全係数が総合安全係数の値をほぼ決定することになる。

(2) 第2の実施形態

本発明の第2の実施形態について図面に基づいて説明すれば、以下の通りである。本実施形態に係る有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法は、第1の実施形態において、床が繊維の穂立ちを有する敷物で構成されている場合の、化合物の振る舞いを予測するものである。なお、説明の便宜上、上記の実施の形態の図面に示した部材と同一の部材には同一の符号を付記し、その説明を省略する。ここでは、噴霧箇所の種類のみをカーペットとし(例えば、図2中のcで示す床噴霧域がカーペットであるとする)、それ以外の床は単なる平面として取り扱った場合について説明し、第1の実施形態と異なる部分のみの説明を行う。

尚、床(全面)の種類もカーペットとしてよいが、噴霧箇所以外の床には浮遊粒子が落下するだけであり、床がフローリングの場合の挙動と大きく変わらないので、床のFugacity capacityは粒子構成溶媒成分含有率で補正するだけでよいことが多い。

まず、カーペットを図 6 A、図 6 B 及び図 6 C に示すようにモデル化する。つまり、カーペットを、基材の上に植設された複数のカーペット繊維（繊維の穂立ち）とそれらの繊維間に存在する空間部分とに分ける。このようなカーペットが床全面に敷かれた部屋で薬剤を残留噴霧すると、噴霧箇所のカーペット繊維には薬剤がしみ込むと共に、空間部分には薬剤が溜まることになる。

本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法も、図 1 のフローチャートにしたがうが、S 1 では、1 次条件として、第 1 の実施形態の 1 次条件（表 1 ～表 4 参照）に、表 1 4 に示すカーペット関連 1 次条件が追加される。尚、カーペットの空間部分の断面積（ A_c ）は、空間部分が室内空気と接触する面積のことである（図 6 A、図 6 B 及び図 6 C 参照）。

表14

カーペット関連1次条件	記号	数値例
カーペット		
カーペットの空間部分の断面積	A_c	1.6×10^{-3} [m ² /m ² 床]
カーペット繊維が空間部分の化合物と接触する面積	A_{cl}	0.192 [m ² /m ² 床]
カーペット繊維が化合物と接触する面積	A_{al}	1.19 [m ² /m ² 床]
製品の性質		
製品中に含まれる溶剤(Xylene)の含有率	C_{sd}	
製品の希釈倍率	X_{sol}	

尚、表 1 4 における数値例は、図 6 A、図 6 B 及び図 6 C に示す数値に基づいたものである。ここでは、1 つの空間部分を $0.1 \text{ [mm]} \times 0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]}$ 、1 角のカーペット繊維を $2.5 \text{ [mm]} \times 2.5 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]}$ の大きさとしている。また、 $1 \text{ [cm}^2\text{]}$ 中に 16 [個] のカーペット繊維があるものとする。

5 この場合には、各パラメータは、

$$A_c = (0.1 \text{ [mm]} \times 0.1 \text{ [mm]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ = 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]}$$

$$A_{c1} = (0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]} \times 4 \text{ [面]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ = 0.192 \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]}$$

10 $A_1 = 1 - A_c$
 $= 1 - 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床}]$

$$A_{a1} = A_1 + A_{c1} \\ = 1.19 \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床}]$$

と求めることができる。ここで、 A_1 は、第 1 の実施形態では噴霧箇所占有面

15 積であったが、 $1 \text{ [m}^2\text{]}$ 中のカーペット繊維が室内空気と接する面積に置換する。

S 2 における 2 次条件としては、第 1 の実施形態の 2 次条件に、表 1 5 に示すカーペット関連 2 次条件が追加される。尚、 k_1 及び V_1 は、第 1 の実施形態（表 6 参照）では噴霧箇所中の化合物の移動速度、及び噴霧箇所の体積であったが、各々カーペット繊維内での化合物の移動速度、及びカーペットの全繊維の体積に置換することとする。

20

表15

カーペット関連 2 次条件	記号
一義的要因条件	
空間部分の薬剤の蒸発定数	R_d
空間部分の温度 (T_d) での湿度	H_m
カーペットの全繊維の体積	V_l
製品中の化合物の移動速度	k_c
製品の性質変化定数	a
経時的変化条件	
空間部分の薬剤と空気との間の 化合物の移動係数	D_{c4}
空間部分の薬剤とカーペット繊維との間の 化合物の移動係数	D_{c1}
空間部分の薬剤の体質	V_c
空間部分の薬剤の Fugacity capacity	Z_c

上記表 1 5 に示した一義的要因条件及び経時的変化条件の算出法を、水性エアゾール使用の場合、即ち粒子構成溶媒が水の場合を例にして以下に説明する。

カーベットの空間部分に入り込んだ薬剤の蒸発定数 (R_d) は、空間部分の断面積 (A_c)、室温 (T)、及び湿度 (H) より、

$$\left. \begin{aligned} R_d &= A_c h (H_m - H) / C_H \\ C_H &= 0.24 + 0.46 H \\ h &= 3.06 \times 10^{-4} (T - T_d)^{1/3} \end{aligned} \right\} \quad \dots(20)$$

と表される。ここで、 T_d はカーベットの空間部分の温度 (湿球温度に相当) であり、 H_m は T_d における空間部分の湿度 (湿球温度での飽和湿度に相当) である。尚、 T_d 及び H_m は、室温 (T) 及び湿度 (H) に基づき、前述の「質量基準湿度表」から求めることができる。オイルベースの製品 (エアゾール) の場合、水とオイルの性質を比較し、 R_d に乗じて薬剤の蒸発定数を算出することができるが、オイルの蒸発が遅い場合 $R_d = 0$ としてもよい。カーベットの空間部分に入り込んだ薬剤は、蒸発によってその体積が減少し、最後には化合物を残して消えてしまう。そして、残った化合物がカーベット繊維にしみ込むことになる。

カーベットの全繊維の体積 (V_1) は、床・壁・天井中の拡散係数 (D_c) 及びカーベット繊維が化合物と接触する面積 (A_{a1}) に基づいて、以下のように求められる。

$$V_1 = 2\sqrt{D_c / t A_{a1} A_t} \quad \dots(21)$$

製品中の化合物の移動速度 (k_c) は、室内空気における化合物の移動速度を示す k_4 ($= G V_4 / A_4$) を用いて、 $k_4 / 100$ と表される。

カーベットの空間部分の薬剤と空気との間の化合物の移動係数 (D_{c4}) は、上記製品中の化合物の移動速度 (k_c)、室内空気における化合物の移動速度 (k_4)、噴霧箇所の面積 (A_t)、空間部分の断面積 (A_c)、後述の式 (24) で求められる空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c)、及び第 1 の実施形態の式 (4) で求められる空気の Fugacity capacity (Z_4) より、次のように表される。

$$D_{c4} = \frac{1}{1/(k_c A_c A_t Z_c) + 1/(k_4 A_c A_t Z_4)} \quad \dots(22)$$

空間部分の薬剤とカーペット繊維との間の化合物の移動係数 (D_{c1}) は、製品中の化合物の移動速度 (k_c)、拡散係数 (D_c)、噴霧箇所の面積 (A_t)、カーペット繊維が空間部分における化合物と接触する面積 (A_{c1})、空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c)、及び第 1 の実施形態の式 (2) で求められる床の Fugacity capacity (Z_1) より、

$$D_{c1} = \frac{1}{1/(k_c A_{c1} A_t Z_c) + 1/(k_1 A_{c1} A_t Z_1)} \quad \dots(23)$$

と表される。但し、カーペット繊維内での化合物の移動速度 (k_1) は、(D_c / t)^{0.5} と表される。

空間部分の薬剤の体積 (V_c) は、噴霧箇所の面積 (A_t)、粒子構成溶媒放出量 (O_g)、及び式 (20) で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d) より求まる。この空間部分の体積 (V_c) は、薬剤中の溶媒が完全に蒸発するまで減少する。

空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow})、及び製品の性質変化定数 (a) より、次のように表される。

$$Z_c = (e^{-a} K_{ow} + 1 - e^{-a}) C^s / P^s \quad \dots(24)$$

ここで、製品の性質変化定数 (a) は、式 (20) で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d)、製品中に含まれる溶剤 (xylene) の含有率 (C_{sd})、及び製品の希釈倍率 (X_{s01}) に基づき算出することができる。即ち、空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c) は、

$$Z_c = \{ (\text{製品中の有機溶剤の比率}) K_{ow} + (\text{製品中の水の比率}) \} \times C^s / P^s$$

とも表され、この式と上記式 (24) とを連立することにより、製品の性質変化定数 (a) が算出される。尚、オイルベースの製品 (エアゾール) の場合、空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow}) により、第 1 の実施形態の式 (5) で与えられる。

これにより、カーペットの空間部分の化合物の振る舞いは、Fugacity (f)

c) に関する微分方程式として、以下のように示される。

$$\begin{aligned} \frac{df_c}{dt} V_c Z_c &= \gamma_1 \sum_{i=1}^3 n_i A_c V_i Z_i f_i && \text{Deposition(i)} \\ &+ R_d A_i Z_c f_c && \text{V - change} \\ &- D_{c1}(f_c - f_1) && \text{Transference(j)} \\ &- D_{c4}(f_c - f_4) && \text{Transference(5)} \\ &- K_c V_c Z_c f_c && \text{Degradation} \end{aligned} \quad \dots(25)$$

また、第 1 の実施形態における式 (15) 及び式 (17) を、

$$\begin{aligned} \frac{df_1}{dt} V_1 Z_1 &= \sqrt{D_c / t} A_{c1} A_i Z_1 f_i && \text{V - change} \\ \text{F - change} &+ \sum_{i=2}^3 n_i A_1 A_i V_i Z_i f_i && \text{Deposition(i)} \\ &- D_{c1}(f_1 - f_c) && \text{Transference(c)} \\ &- D_{14}(f_1 - f_4) && \text{Transference(1)} \\ &- K_1 V_1 Z_1 f_1 && \text{Degradation} \end{aligned} \quad \dots(26)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_4}{dt} V_4 Z_4 &= -GV_4 Z_4 f_4 && \text{Ventilation} \\ \text{F - change} &- \sum_{i=2}^3 n_i D_{i4}(f_4 - f_i) && \text{Transference(i)} \\ &- \sum_{j=5}^7 D_{4j}(f_4 - f_j) && \text{Transference(j)} \\ &- K_4 V_4 Z_4 f_4 && \text{Degradation} \\ &- D_{c4}(f_4 - f_c) && \text{Transference(c)} \\ &- D_{14}(f_4 - f_1) && \text{Transference(1)} \end{aligned} \quad \dots(27)$$

にそれぞれ置換する。

式 (26) において、v-change の項はカーペット繊維の体積変化（時間と共に増加）を、Deposition(i) の項は粒子の落下に伴う付着を、Transference(c) の項はカーペット繊維と空間部分との間の化合物の移動量を、Transference(1) の項はカーペット繊維と空気との間における化合物の移動量を、Degradation の項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

また、式 (27) において、ventilation の項は化合物の室内からの排出量を、Transference(i) の項は空気と粒子との間の化合物の移動量を、Transference(j) の項は空気と床・天井・壁との間の化合物の移動量を、Degradation の項は化合物の光分解量の変化を、Transference(c) の項は空気と噴霧箇所との間の化合物の移動量を、Transference(1) の項は空気と噴霧

箇所のカーペット繊維との間の化合物の移動量を各々示している。

従って、S 3でのFugacity計算は、第1の実施形態の式(16)、(18)、及び上記(25)ないし(27)の8種の微分方程式をルンゲクッタ法で解くことによって行われる。その後のS 4ないしS 17の工程は、第1の実施形態と同様である。

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、噴霧箇所の種類が繊維の穂立ちと穂立ち間の空間部分とを有するカーペットの場合には、噴霧箇所、2種の浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井における化合物のFugacityに関する7種の連立微分方程式に、上記カーペットの空間部分のFugacityの微分方程式を加えて、各Fugacityを計算するものである。

これにより、空間部分に薬剤が溜まることから平坦な床の場合とは化合物の振る舞いが異なる場合でも、正確に化合物の挙動を予測することが可能となり、多様なシミュレーションが行える。

(3) 第3の実施形態

本発明の第3の実施形態について図面に基づいて説明すれば、以下の通りである。

本実施形態にかかる殺虫剤等の薬剤(溶液)に含まれる有害生物防除活性化合物(以下、単に化合物と称する)の室内挙動シミュレーション方法では、主に蚊やハエ等の室内の害虫を駆除するために薬剤を空間噴霧した場合の化合物の振る舞いを予測するものである。尚、上記薬剤はピレスロイド系殺虫性化合物及び有機リン系殺虫性化合物を含むすべての殺虫剤等である。

まず、環境を、図11に示すように、各々の直径が異なる大粒子(エアゾール粒子)2、中粒子(エアゾール粒子)8、及び小粒子(エアゾール粒子)3と、室内全体の空気4と、床5と、壁6と、天井7との7種の媒体に分類する。

粒子を3種に分けるのは、粒子の振る舞いが主にその直径に依存しているためであり、噴霧直後は各粒子は同一箇所に分布するが、時間が経てば、大粒子2はその重さのため床5に近い噴霧領域SZ₂、中粒子8は室内の中間にある噴霧領域SZ₈、そして小粒子3は他の2つの粒子に比べて軽いため天井7に近い噴霧

領域 SZ_3 にそれぞれ分布することになるからである。

上記 7 種の媒体における化合物の Fugacity に関する連立微分方程式を立て、これをルンゲクッタ法を用いて解くことによって、薬剤を室内空間に噴霧した際の薬剤中の化合物の室内挙動、即ち室内における化合物分布の経時的变化を予測解析する。

このとき、床 5 の種類としては、主に畳、フローリング、及びカーペット（敷物）の 3 種があるので、床種類に応じた微分方程式を立てることとする。本実施形態では、床 5 を畳とした場合について説明する。

図 1 に基づいて、上記化合物の室内挙動予測方法を説明する。本実施形態にかかるシミュレーション方法は、大きくは、室内環境を所定の媒体に分割し、各媒体における化合物の逸散度に関する微分方程式を立てる工程（S 1 ～ S 2）と、上記微分方程式から、各媒体における化合物の逸散度を求める工程（S 3）と、各媒体における化合物の逸散度から、化合物の室内挙動を求める工程（S 4）と、微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、室内における化合物のマスバランスの変動に応じて変化させる工程（S 2 1 ～ S 3 5、図 5 参照）と、化合物の室内挙動に基づいて、化合物の人体に対する安全性を評価する工程（S 5 ～ S 1 7）に分割できる。

まず、ステップ（以下、S と略称する）1 で 1 次条件を入力する。この 1 次条件は、化合物の物理化学的性質（表 1 6 参照）、化合物の室内環境挙動性質（表 1 7 参照）、室内環境（表 1 8 参照）、製品の性質（表 1 9 参照）、及び噴霧条件（表 2 0 参照）である。

表16

化合物の物理化学的性質	記号	数値例
分子量	—	277.23 [g/mole]
比重	ρ	1.33×10^6 [g/m ³]
蒸気圧	PS	2.85×10^{-2} [Pa]
水溶解度	CS	5.05×10^{-2} [mole/m ³]
オクタノール／水配分係数	K _{OW}	$10^{3.27}$
融点	T _M	273.45 [K]

表17

化合物の室内 環境挙動性質	記号	数値例
光分解定数 in エアゾール粒子	K _i (i=2,3,8)	8.67×10^{-3} [1/h]
空気	K ₄	1.05×10^{-1} [1/h]
床	K ₅	1.60×10^{-3} [1/h]
壁・天井	K _j (j=6,7)	9.62×10^{-4} [1/h]
対空気移動半減期 in 床	τ_{45}	36.0 [h]
壁	τ_{46}	43.2 [h]
天井	τ_{47}	43.2 [h]

表18

室内環境		記号	数値例
オイルベース	部屋の大きさ	V_4	23.3 [m ³]
	温度	T	297 [K]
	相対湿度	ϕ	60 [%RH]
	絶対湿度	H	1.19×10^{-2} [kg-H ₂ O/kg-dry air]
	換気率	G	1.58 [1/h]
	粒子構成溶媒の室内蒸気圧	P_{∞}	0 [Pa]
	空気拡散係数	D_{air}	1.84×10^{-2} [m ² /h]
	オイル成分の含有率	—	46 [%] (畳の場合) 4 [%] (フローリングの場合) 30 [%] (壁紙の場合)
水ベース	湿球温度	T_d	294 [K]
	水の蒸気圧	P_{∞}	1.89×10^3 [Pa]

但し、 $V_4 = L_4 \times W_4 \times$ 高さである。

表19

製品の性質		記号	数値例
オイルベース	化合物含有量(濃度)	C_a	1.33×10^3 [g/m ³]
	噴霧割合	—	0.45 [g/sec]
	粒子構成溶媒の性質 蒸気圧	P_d	6.92 [Pa]
		分子量	M_d 184.37 [g/mole]
		比重	ρ_d 7.56×10^5 [g/m ³]
	エアゾール粒子の直径 (3種)	d_{02}	50 [μ m]
		d_{08}	30 [μ m]
		d_{03}	10 [μ m]
	エアゾール粒子の分布 (3種)	—	30 [%] (大粒子)
		—	60 [%] (中粒子)
		—	10 [%] (小粒子)
水ベース	粒子構成溶媒の性質 蒸気圧	P_d	2.26×10^3 [Pa]
		分子量	M_d 18 [g/mole]
		比重	ρ_d 1×10^6 [g/m ³]

表20

噴霧条件	数値例
噴霧時間	10 [sec]
噴霧高さ	1.6 [m]

尚、表 1 6 ないし表 2 0 における数値例は、夏の典型的な日本のアパートの 6 畳間 (9.72 [m²]) を想定したものである (図 1 4 参照)。

- 次に、上記 1 次条件を用いて 2 次条件を計算で求める (S 2)。この 2 次条件には、1 次条件のみで求まり、時間的に変化しない一義的要因条件 (表 2 1 参照) と、時間的な変化を伴う経時的変化条件 (表 2 2 参照) とがある。これらの計算は後で詳細に説明する。
- 5

表21

一義的要因条件	記号
噴霧直後のエアゾール粒子数	n_{0i} ($i=2,8,3$)
エアゾール粒子の蒸発定数	α
製品中の化合物の体積割合	R_a
空気中の化合物の拡散係数	D_{ca}
床・壁・天井の表面積	A_j ($j=5,6,7$)
床・壁・天井の拡散係数	D_c
Fugacity capacity of エアゾール粒子 空気 床・壁・天井	Z_i ($i=2,8,3$) Z_4 Z_j ($j=5,6,7$)

表22

経時的変化条件	記号
エアゾール粒子の直径	d_i ($i=2,8,3$)
落下速度	v_i ($i=2,8,3$)
浮遊数	n_i ($i=2,8,3$)
エアゾールゾーンの幅	L_{zi} ($i=2,8,3$)
化合物の移動速度	
in エアゾール粒子	k_i ($i=2,8,3$)
空気	k_4
床・壁・天井	k_j ($j=5,6,7$)
エアゾール粒子と空気との間の	
化合物の移動係数	D_{i4} ($i=2,8,3$)
空気と床・壁・天井との間の	
化合物の移動係数	D_{4j} ($j=5,6,7$)
エアゾール粒子の体積	V_i ($i=2,8,3$)
床・壁・天井の体積	V_j ($j=5,6,7$)

上記2次条件を用いて7種のFugacityを計算する(S3)。即ち、大・中・小粒子2・8・3、空気4、床5、壁6及び天井7に関する7種の微分方程式を連立し、これをルンゲクッタ法で解き、7種のFugacityを経時的に算出する。ここで、微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅(微小時間単位)は、化合物のマスバランスの変動に合わせて自動的に可変して設定されるようになっている。

S4で、上記算出された大・中・小粒子2・8・3のFugacity($f_i, i=2, 8, 3$)及び空気4のFugacity(f_4)を用いて化合物の経時的室内空气中濃度を、床5のFugacity(f_5)を用いて化合物の床残留量を各々算出する。

10 S5で、薬剤を吸入した場合における安全性評価を行うか否かを判断し、吸入における安全性評価を行う場合には、上記経時的室内空气中濃度を用いて、汚染された空気を吸入することによって、どの程度曝露されるかを示す吸入推定曝露量を計算する(S6)。その後、吸入推定曝露量に基づいて吸入安全係数を算出する(S7)。S8で、国毎に定められた基準値と上記吸入安全係数とを比較し、
15 基準値に対して吸入安全係数が上回れば「安全性に問題なし」との判断を下す。一方、S8で基準値に対して吸入安全係数が下回れば、「安全性に問題あり」との判断を下し、S1へ戻って例えば、化合物の変更、製剤処方の変更、あるいは使用条件の変更等の1次条件の変更を検討する。

また、上記S5で吸入における安全性評価でない場合には、薬剤が付着した床
20 5に接触することによって皮膚がどの程度曝露されるかを示す経皮推定曝露量を計算する(S9)。その後、S10で経皮における安全性評価を行うか否かを判断し、経皮における安全性評価を行う場合には、上記経皮推定曝露量に基づいて経皮安全係数を算出する(S11)。S12で、吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経皮安全係数とを比較することによって安
25 全性を評価する。S12で安全性に問題がある場合にはS1に戻って1次条件の変更を検討する。

また、上記S10で経皮における安全性評価でない場合には、S13で上記経皮推定曝露量に基づいて、手等に付着した薬剤が口から入ることによってどの程度曝露されるかを示す経口推定曝露量を計算し(S13)、続いて、この経口推

定曝露量に基づいて経口安全係数を算出する (S 1 4)。この経口曝露は、特に幼児が薬剤の付着した手を口に入れることによって起こる可能性がある。S 1 5で吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経口安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S 1 5で安全性に問題がある場合にはS 1に戻って1次条件の変更を検討する。

最後に、S 8、S 1 2、あるいはS 1 5において、安全であると判断された場合には総合的な安全性の評価を行う。ここでは、先に求められた吸入安全係数、経皮安全係数、及び経口安全係数の各々の逆数の和を求めて、得られた値を逆数にすることにより、総合安全係数を求める (S 1 6)。この総合安全係数を基準値と比較することによって、先の安全性評価と同様の評価を行う (S 1 7)。

次に、上記S 2～S 4、S 6、S 7、S 9、S 1 1、S 1 3、及びS 1 4の工程について詳細に説明する。

(i) 2次条件計算 (S 2)

上記表 2 1 に示した一義的要因条件、及び表 2 2 に示した経時的変化条件の計算を説明する。

噴霧直後の大・中・小粒子 2・8・3 の粒子数 ($n_{0i}, i=2, 8, 3$) は、噴霧割合、噴霧直後の粒子の直径 ($d_{0i}, i=2, 8, 3$)、粒子の分布 (3 種)、及び噴霧時間より求められる。この粒子数 (n_{0i}) は、噴霧領域 ($S Z_i, i=2, 8, 3$) の底が床 5 に到達するまでの間一定である。

大・中・小粒子 2・8・3 の蒸発定数 (α) は、粒子の表面温度 (T_d)、粒子構成溶媒の性質 (蒸気圧 P_d 、分子量 M_d 、比重 ρ_d)、及び室内環境 (空気拡散係数 D_{air} 、蒸気圧 P_∞ 、室温 T_∞) より、

$$\alpha = \frac{4D_{air}M_d}{R\rho_d} \left(\frac{P_d}{T_d} - \frac{P_\infty}{T_\infty} \right) \quad \dots(28)$$

と定義される。但し、R は気体定数である。

尚、上記表 1 8 及び表 1 9 の上部は空間噴霧エアゾールがオイルベースの場合を例示し、この場合には T_∞ (エアゾール粒子から遠く離れた箇所の温度) や T_d は室温 (T) とし、 P_∞ (エアゾール粒子から遠く離れた箇所のオイルの蒸気圧) はゼロとする。

また、空間噴霧エアゾールが水ベースの場合には、式(28)の P_d 、 M_d 、 ρ_d 、 T_d 、及び P_∞ は水の性質に基づく値に変更する必要がある。具体的には、室温(T)が298[K](=25℃)、相対湿度が60[%RH]時の上記要因値を表18及び表19の下部に例示している。

- 5 尚、 T_d は室温(T)及び絶対湿度(H)に基づき、化学機械の理論と計算(第2版)(亀井三郎編、産業図書)等に記載される「質量基準湿度表」から求めることができる。また、 P_d と P_∞ は、以下の式より算出可能である。

$$\log_{10} P_d = 10.23 - 1750 / (T_d - 38)$$

$$\log_{10} P_\infty = 8.23 - 1750 / (T - 38) + \log_{10} \psi$$

- 10 ここで、 ψ は室内の相対湿度である。

大・中・小粒子2・8・3のFugacity capacity($Z_i, i=2,8,3$)は、化合物の蒸気圧(P^s)、融点(T_M)、及び粒子の表面温度(T_d)より、

$$Z_i = \frac{6 \times 10^6}{P_L^s RT_d} \quad \dots(29)$$

$$P_L^s = P^s \exp \{6.79(T_M/T_d - 1)\}$$

- 15 と表される。ここでは、液体状態の化合物の蒸気圧(P_L^s)を T_M と T_d を用いて算出しているが、 T_M が得られない場合、 P_L^s は固体状態の化合物の蒸気圧(P^s)と同じとしてよい。

空気4のFugacity capacity(Z_4)は、室温(T)より、

$$Z_4 = \frac{1}{RT} \quad \dots(30)$$

と表される。

- 20 床5、壁6、及び天井7のFugacity capacity($Z_j, j=5,6,7$)は、化合物の蒸気圧(P^s)、水溶解度(C^s)、オクタノール/水分配係数(K_{ow})、及び床5、壁6、及び天井7を構成する材質のオイル成分の含有率($\rho_j, j=5,6,7$)より、

$$Z_j = \rho_j K_{ow} C^s / P^s \quad \dots(31)$$

- 25 と表される。

時間 t での大・中・小粒子2・8・3の直径($d_i, i=2,8,3$)は、粒子の体積

が粒子構成溶媒成分の蒸発により時間と共に小さくなるので、粒子構成溶媒成分が蒸発している間については、噴霧直後 ($t = 0$) の粒子の直径 (d_{0i})、及び式 (28) より求まる蒸発定数 (α) を用いて以下の式 (32) の通りとなる。

$$d_i = \sqrt{d_{0i}^2 - 2\alpha t} \quad \dots(32)$$

$$5 \quad d_i = \sqrt[3]{R_a d_{0i}} \quad \dots(32')$$

一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の直径 (d_i) は、製品中の化合物の体積割合 (R_a) と噴霧直後の粒子の直径 (d_{0i}) とを用いて、上記の式 (32') の通りとなる。

10 製品中の化合物の体積割合 (R_a) は、化合物含有量 (C_a) 及び化合物の比重 (ρ) より、 C_a / ρ として表される。

粒子構成溶媒成分が蒸発し終わるまでの大・中・小粒子 2・8・3 の落下速度 ($v_i, i=2, 8, 3$) は、粒子の動きが重力と空気抵抗に支配されているので、粒子構成溶媒の比重 (ρ_d)、及び式 (32) より求まる粒子の直径 (d_i) を用いて、ストークスの法則より以下の式 (33) となる。

$$15 \quad v_i = \frac{\rho_d g S_c}{18\eta} d_i^2 = \beta d_i^2 = \beta (d_{0i}^2 - 2\alpha t) \quad \dots(33)$$

$$S_c = 1 + \frac{2}{7.6 \times 10^7 d_i} \{6.32 + 2.01 \exp(-8.322 \times 10^6 d_i)\} \quad \dots(33')$$

$$v_i = (\rho / \rho_d) \beta d_i^2 \quad \dots(33'')$$

20 但し、 g は重力加速度、 η は空気 4 の粘性率、 S_c はすべり補正係数、及び β は速度係数である。ここで、すべり補正係数 (S_c) は、粒子が小さくなるとストークスの法則に従わなくなるので、これを補正するための係数であり、式 (32) より求まる粒子の直径 (d_i) により上記の式 (33') で示される。

一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の落下速度 (v_i) は、化合物の比重 (ρ)、粒子構成溶媒の比重 (ρ_d)、速度係数 (β)、及び式 (32') より求まる粒子の直径 (d_i) により上記に示す式 (33'') と表される。

25 噴霧領域 (SZ_i) の底が床 5 に付いた後の大・中・小粒子 2・8・3 の浮遊数 ($n_i, i=2, 8, 3$) は、噴霧高さ、後述の式 (35) で求まるエアゾールゾーン幅 (L_{zi})、式 (33) あるいは式 (33'') より求まる粒子の落下速度

(v_i)、及び上記噴霧直後の粒子数 (n_{0i}) より、

$$n_i = n_{0i} \left[1 - \frac{v_i}{L_{zi}} (t - t_{xi}) - Gt \right] \quad \dots(34)$$

と表される。但し、 t_{xi} は、噴霧領域 (SZ_i) の底が床5に到達するまでの時間であり、 $t < t_{xi}$ である。ここで、 G は換気率であり、大・中・小粒子 $2 \cdot 8 \cdot 3$ は、床、壁、天井に付着して消滅する以外に、換気により室外へ排出されることも考慮した。また、 L_{zi} は噴霧による浮遊粒子の散布幅であり、式 (35) によっても求められるが、簡略化して、散布直後の散布幅をそのまま用いてもよい。

エアゾールゾーンの幅 ($L_{zi}, i=2, 8, 3$) は、噴霧領域 (SZ_i) の底が床5に到達した後の噴霧領域の幅 (高さ) のことであり、噴霧領域 (SZ_i) が式 (33) あるいは式 (33'') で求まる粒子の落下速度 (v_i) を変えながら床5に吸収されるので、噴霧高さ及び上記落下速度 (v_i) より、

$$L_{zi} = \int_{t_{xi}}^{t_{yi}} v_i dt \quad \dots(35)$$

と定義される。但し、 t_{yi} は、噴霧領域 (SZ_i) が床5に完全に吸収されるまでの時間である。

大・中・小粒子 $2 \cdot 8 \cdot 3$ と空気4との間の化合物の移動係数 ($D_{i4}, i=2, 8, 3$) は、粒子中の化合物の移動速度 ($k_i, i=2, 8, 3$)、空気中の化合物の移動速度 (k_4)、式 (32) あるいは式 (32') より求まる直径 (d_i)、式 (29)、(30) で求まるFugacity capacity (Z_i)、及び (Z_4) より、

$$D_{i4} = \frac{1}{1/(k_i A_i Z_i) + 1/[(k_4 + v_i) A_i Z_i]} \quad \dots(36)$$

となる。

ここで、 $A_i (= \pi d_i^2)$ は、粒子の表面積である。また、空気中の化合物の移動速度 (k_4) は、換気率 (G) より、 GV_4/A_4 として示される。粒子中の化合物の移動速度 (k_i) は、空気中の化合物の移動速度 (k_4) より、 $k_4/100$ として表される。ここで、上記 A_4 は、図14に示すように、空気4の移動方向 (図中矢印方向) に対する部屋の断面積のことである。

床5・壁6・天井7中の化合物の移動速度(k_j)は、床5・壁6・天井7中の化合物の拡散係数(D_c)を用いて、 $(D_c/t)^{0.5}$ と表される。ここで、 D_c は以下のようにして算出可能である。即ち、 D_c は空気中の化合物の拡散係数($D_{c,a}$)に 10^{-9} を乗じて求めることが可能であり、 $D_{c,a}$ は化合物の性質(構造、分子量等)から例えば、Wike and Lee Method (Handbook of Chemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill Book Company, 1982)に従って、算出可能である。

空気4と、床5・壁6・天井7と間の化合物の移動係数(D_{4j} , $j=5,6,7$)は、床5・壁6・天井7の各々における対空気移動半減期(τ_{4j} , $j=5,6,7$)、部屋の大きさ(V_4)、後述の式(39)で求まる床5・壁6・天井7の体積(V_j)、式(30)、(31)で求まるFugacity capacity(Z_4)、及び(Z_j)より、以下に示す式(37)の通りとなる。

$$D_{4j} = \frac{0.693}{\tau_{4j} \{1/(V_4 Z_4) + 1/(V_j Z_j)\}} \quad \dots(37)$$

$$D_{4j} = \frac{1}{1/(k_4 A_j Z_4) + 1/(k_j A_j Z_j)} \quad \dots(37')$$

また、上記移動係数(D_{4j})は、空気中の化合物の速度(k_4)、床5・壁6・天井7中の化合物の速度(k_j)、床5・壁6・天井7の表面積(A_j , $j=5,6,7$)、及び式(30)、(31)で求まるFugacity capacity(Z_4)(Z_j)より、上記式(37')に示す式によっても求めることが可能である。上記床5、壁6、及び天井7の表面積(A_j)は、それぞれ部屋の大きさ($V_4 = L_4 \times W_4 \times \text{高さ}$)より求められる。

尚、式(37)における対空気移動半減期(τ_{4j})は実測することが難しく、また様々な条件下で値が異なるため、正確な値を求めることが困難である。これに対して、式(37')におけるすべてのパラメータは、測定を必要とせず、計算によって容易に求めることができる。従って、移動係数(D_{4j})は、式(37)よりも式(37')で求める方が好ましい。

大・中・小粒子2・8・3の体積(V_i , $i=2,8,3$)は、式(32)あるいは式

(32') より求まる粒子の直径 (d_i) を用いて、

$$V_i = \frac{\pi}{6} d_i^3 \quad \dots(38)$$

と表される。

床5、壁6、及び天井7の体積 ($V_j, j=5,6,7$) は、薬剤が噴霧される前の床5・壁6・天井7を薄い膜状のものと考え、薬剤がそれらの膜にしみ込むにつれてその厚みが増して体積が増加するものと考え、上記床5・壁6・天井7の表面積 (A_j) 及び床5・壁6・天井7中の化合物の拡散係数 (D_c) より、

$$V_j = 2\sqrt{D_c t} A_j \quad \dots(39)$$

となる。

10 (ii) Fugacity計算 (S3)

大・中・小粒子2・8・3中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_i) に関する微分方程式として、

$$\begin{array}{lll} \frac{df_i}{dt} V_i Z_i & = & \frac{\pi}{2} \alpha d_i Z_i f_i \quad V\text{-change} \\ F\text{-change} & - D_{i4}(f_i - f_4) & Transference(4) \\ & - K_i V_i Z_i f_i & Degradation \end{array} \quad \dots(40)$$

と表される。ここで、v-changeの項は大・中・小粒子2・8・3の体積変化(時間と共に減少)を、Transference(4)の項は粒子と空気4との間における化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化を各々表している。このとき、上記表17に示すような光分解定数の内、空気中の化合物の分解定数 (K_4) は、実測が難しく、この値を決定するのは容易でないことが多い。そこで、実測値が入手できない場合、化合物の構造式を用いて、Atmospheric Oxidation program (Atkinson et al., 1984, Chem. Rev. Vol.84, pp437-470) で算出し求める方法もある。また、粒子中並びに内装材(床5・壁6・天井7)中の光分解定数については、実測値が入手できない場合、居住者の安全性を見込みゼロとすることも可能である。尚、v-changeの項は粒子構成溶媒成分が蒸発している間のみ有効であり、Fugacity (f_i) は噴霧領域 ($S Z_i$) が存在している間有効である。

空気中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_4)に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned}
 \frac{df_4}{dt} V_4 Z_4 &= -GV_4 Z_4 f_4 && \text{Ventilation} \\
 F - \text{change} &- \sum_{i=2,6,3} n_i D_{i4} (f_4 - f_i) && \text{Transference(i)} \\
 &- \sum_{j=5}^7 D_{4j} (f_4 - f_j) && \text{Transference(j)} \\
 &- K_4 V_4 Z_4 f_4 && \text{Degradation} \quad \dots(41)
 \end{aligned}$$

と表される。ここで、Ventilationの項は化合物の室内からの排出量を、Transference(i)の項は空気4と粒子との間における化合物の移動量を、Transference(j)の項は空気4と床5・壁6・天井7との間における化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

床5、壁6、及び天井7中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_5) (f_6) (f_7)に関する微分方程式として、それぞれ、

$$\begin{aligned}
 \frac{df_5}{dt} V_5 Z_5 &= -\sqrt{D_c/t} A_5 Z_5 f_5 && V - \text{change} \\
 F - \text{change} &+ \gamma_5 \sum_{i=2,6,3} \frac{n_{0i}}{L_{zi}} v_i V_i Z_i f_i && \text{Deposition(i)} \\
 &- D_{45} (f_5 - f_4) && \text{Transference(4)} \\
 &- K_5 V_5 Z_5 f_5 && \text{Degradation} \quad \dots(42)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{df_6}{dt} V_6 Z_6 &= -\sqrt{D_c/t} A_6 Z_6 f_6 && V - \text{change} \\
 F - \text{change} &+ \gamma_6 \sum_{i=2,6,3} \frac{n_{0i}}{L_{zi}} v_i V_i Z_i f_i && \text{Deposition(i)} \\
 &- D_{46} (f_6 - f_4) && \text{Transference(4)} \\
 &- K_6 V_6 Z_6 f_6 && \text{Degradation} \quad \dots(43)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{df_7}{dt} V_7 Z_7 &= -\sqrt{D_c/t} A_7 Z_7 f_7 && V - change \\
 F - change &+ \gamma_7 \sum_{i=2,5,3} \frac{n_{0i}}{L_{zi}} v_i V_i Z_i f_i && Deposition(i) \\
 &- D_{47} (f_7 - f_4) && Transference(4) \\
 &- K_7 V_7 Z_7 f_7 && Degradation \quad \dots(44)
 \end{aligned}$$

と表される。ここで、各式のV-changeの項は床5・壁6・天井7の体積変化（時間と共に増加）を、Transference(4)の項は床5、壁6あるいは天井7と空気4との間における化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の变化をそれぞれ示している。また、Deposition(i)の項は粒子の落下に伴う付着を示している。ここで、 γ_5 、 γ_6 、 γ_7 は大・中・小粒子2・8・3が床5、壁6、天井7にそれぞれ付着する割合を表しており、主に換気率に左右される（例えば換気率が1.58 [1/hour] の時、 $\gamma_5=0.93$ 、 $\gamma_6=0.06$ 、 $\gamma_7=0.01$ となる）。 γ_5 、 γ_6 、 γ_7 を導入することで、化合物の挙動を精度よく予測することができる。 γ_5 、 γ_6 、 γ_7 が求められない場合は、安全性評価の上では最悪のケースを想定し、 $\gamma_5=1$ 、 $\gamma_6=0$ 、 $\gamma_7=0$ として計算することが好ましい。

上記式(40)ないし(44)の7種の微分方程式を連立してルンゲクッタジル法にて解くことにより、Fugacity ($f_2 \sim f_8$) を算出する。

この連立微分方程式を解くときに、微小時間単位である予測刻み時間幅 (dt) を設定する必要がある。つまり、予測刻み時間幅は、まず時間 (t_0) での連立微分方程式の解を求め、次に予測刻み時間幅を加えた ($t_0 + dt$) 時間での微分方程式の解を求めることであり、予測刻み時間幅を次々と加えながら解を得ることによって経時的に変化するFugacityが求められる。理論的には、上記予測刻み時間幅の設定時間が小さければ小さいほど正確な解を得ることができるが、計算時間が非常に長くなる。逆に、設定時間が大き過ぎると解が発散して、解に誤りが生じ易くなる。

そこで、本願発明では、非常に大きな変化が薬剤に起こるときには予測刻み時間幅が小さく設定されるように、逆に大きな変化がない場合には予測刻み時間幅が大きく設定されるようにしている。

具体的には、薬剤の投入量と得られた解とが合致するように常にマスバランスを確認し、マスバランスが大きく変動しない場合には予測刻み時間幅を大きく、マスバランスが変動し始める場合には予測刻み時間幅を小さくする。例えば、マスバランスの変動を±5%の精度に設定すると、

$$5 \quad \text{化合物投入量} / (\text{存在量} + \text{分解量} + \text{排出量}) = 0.95 \sim 1.05$$

の関係が常に満たされるように、即ちマスバランスの変動が±5%の範囲内に納まるように予測刻み時間幅を絶えず設定する。

ここで、上記化合物投入量は、化合物含有量 (C_a)、噴霧割合、及び噴霧時間より求められる。また、存在量は、連立微分方程式で7種の媒体中の経時的な化合物量が求められるので、それらを合計して以下のように算出する。

$$\left. \begin{aligned} \text{存在量} &= \sum_{i=2,3} n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 f_k V_k Z_k \\ \text{分解量} &= \sum_{i=2,3} n_i K_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 K_k f_k V_k Z_k \\ \text{排出量} &= GV_4 Z_4 f_4 \end{aligned} \right\} \dots(45)$$

分解量及び排出量も上記に示す通りである。

図5のフローチャートに基づいて、この予測刻み時間幅 (dt) の設定方法を説明する。

15 まず、予測刻み時間幅 (dt) の初期値を入力し (S21)、次にマスバランスの差の上限である上限設定値 (例えば0.1 [%])、及びマスバランスの差の下限である下限設定値 (例えば 10^{-6} [%]) を入力する (S22)。その後、 $t = t_0$ のFugacity及びマスバランスを計算し (S23・S24)、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のFugacity及びマスバランスを計算する (S25・S26)。

20 マスバランスの変動が±5%の範囲内であるかどうかを確認し (S27)、マスバランスの変動が±5%の範囲内であれば、 $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のマスバランスとの差が上限設定値以上であるか否かを判断する (S28)。S28で上限設定値以上であれば、
25 予測刻み時間幅 (dt) を小さくした方が解が正確になるので、予測刻み時間幅

(dt) を $1/2$ 倍して設定を変更し (S 2 9)、S 2 8 で上限設定値より小さければ S 3 0 で $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のマスバランスとの差が下限設定値以下であるか否かを判断する。

- 5 S 3 0 でマスバランスの差が下限設定値以下であれば、予測刻み時間幅 (dt) を大きくしても解には影響を及ぼさないので、予測刻み時間幅 (dt) を 2 倍して設定を変更し (S 3 1)、次に、S 3 1 で変更した予測刻み時間幅 (dt) が予測刻み時間幅 (dt) の最大値 (例えば、0.1 [hour]) 以下であるか否かを判断する (S 3 2)。S 3 2 で予測刻み時間幅 (dt) が最大値以下の場合には、解は発散しないので、S 3 1 で設定した予測刻み時間幅 (dt) を用いる。一方、S 3 2 で予測刻み時間幅 (dt) が最大値より大きい場合には解が発散する可能性があるので、予測刻み時間幅 (dt) を最大値に設定し直す (S 3 3)。また、上記 S 3 0 において、マスバランスの差が下限設定値よりも大きければ、即ち下限設定値と上限設定値との間にあれば予測刻み時間幅 (dt) は変更せずに計算を続ける。
- 10 上記 S 2 9、S 3 0、S 3 2、あるいは S 3 3 の工程を経ると、S 2 5 へ戻って再び計算を行い、目的の時間に達するまで上記工程を繰り返す。
- 15 一方、S 2 7 において、マスバランスの変動が $\pm 5\%$ の範囲を越えると、マスバランスの変動が大きいので、変動が $\pm 5\%$ の範囲内の場合と比較して予測刻み時間幅 (dt) を小さくして計算を行った方がよい。従って、一旦計算を中止し (S 3 4)、下限設定値を小さく設定し直してから (S 3 5)、S 2 3 の工程へ戻る。

20 このように、予測刻み時間幅を一定値にすることなく、マスバランスの変動をチェックしながら予測刻み時間幅を可変設定することにより、正確に、かつ効率よく Fugacity を算出することが可能となる。

25 (iii) 経時的室内空气中濃度及び床残留量算出 (S 4)

化合物の経時的室内空气中濃度は、上記 (ii) 項目で求められた大・中・小粒子 $2 \cdot 8 \cdot 3$ の Fugacity (f_i) にそれらの Fugacity capacity (Z_i) を掛けたものと、空気 4 の Fugacity (f_4) に空気 4 の Fugacity capacity

(Z_4) を掛けたものとを足し合わせるによって算出される。尚、薬剤の種類によっては大粒子 2 や中粒子 8 が人体に吸入される恐れがないものがあるが、その場合には例えば小粒子 3 のみの Fugacity (f_3) を用いて計算すればよい。

化合物の床残留量は、床 5 の Fugacity (f_5) に床 5 の Fugacity capacity (Z_5) を掛けることによって算出される。

(iv) 吸入推定曝露量及び吸入安全係数計算 (S 6・S 7)

前述した経時的室内空気中濃度は、例えば図 3 A に示すような曲線を描く。この濃度曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積濃度を求め (図 3 B 参照)、この値から平均室内空気中濃度を算出する。尚、上記特定期間は目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

次に、上記平均室内空気中濃度、呼吸量、及び曝露時間に基づいて、吸入推定曝露量を求める。即ち、

吸入推定曝露量 [mg/kg/day] = 平均室内空気中濃度 [mg/m^3] \times

呼吸量 [$\text{m}^3/\text{kg/min}$] \times 曝露時間 [min/day]

の計算を行う。ここで、上記呼吸量は文献値あるいは実測値を用いればよい。また、大人と子供とに呼吸量を分けて考慮すれば、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。また、吸入された有害物質が体内に全て吸収されず、呼吸によって一部排出される場合は、吸入比率を考慮することにより、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。

吸入安全係数は、予め動物実験により調べられた吸入毒性に関する無影響量と、先に求められた吸入推定曝露量とから算出される。即ち、

吸入安全係数 =

吸入無影響量 [mg/kg/day] / 吸入推定曝露量 [mg/kg/day]

で表される。

(v) 経皮推定曝露量及び経皮安全係数計算 (S 9・S 11)

前述の床残留量は、例えば図 4 A に示すような曲線を描く。この残留量曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積残留量を求め (図 4 B 参照)、この値から平均床残留量を算出する。尚、上記特定期間は、目的に応じて

任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

次に、平均床残留量、皮膚付着率、接触面積、及び体重に基づいて、経皮推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{5} \quad \text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} = (\text{平均床残留量 [mg/m}^2\text{]} \times \text{皮膚付着率 [\%]} \times \text{接触面積 [m}^2\text{/day]}) / \text{体重 [kg]}$$

の計算を行う。ここで、上記接触面積は文献値（例えば、4 [m²/day]）を用いればよい。また、皮膚付着率は化合物の存在する床5に皮膚が接触した場合に、化合物が皮膚に付着する割合のことであり、この値は文献値あるいはモデル実験値を用いればよい。

上記皮膚付着率のモデル実験方法は、次の通りである。幼児が床に接する圧力と同様の圧力で、デニムの布（8cm×10cm）の上に重し（8cm×8cm×8cm；4.2 kg）を載せ、幼児が動くような速さ（120cm/15sec）でデニムの布を床上で引っ張る。このデニムと床を分析することにより、デニム及び床に含有される化合物を算出し、その比から皮膚付着率を求める。尚、この方法で得た皮膚付着率は、実際に手を床に押し付けて、手と床の分析値から求めた皮膚付着率と同等か、あるいは若干高めであることが確認されており、居住者の曝露評価を行う上でこのモデル実験方法は有用であることが確認された。

次に、経皮安全係数は、予め動物実験により調べられた経皮毒性に関する無影響量と、先に求められた経皮推定曝露量とから算出される。即ち、

経皮安全係数＝

$$\text{経皮無影響量 [mg/kg/day]} / \text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]}$$

で表される。

しかしながら、一般に経皮無影響量はあまり求められておらず、文献値も多くない。従って、経皮安全係数を、経皮推定曝露量と、文献値が多数存在する経口無影響量及び経皮吸収率を用いて、以下の式に基づいて求める方がより正確な値を求めることができる。

$$\text{経皮安全係数} = \text{経口無影響量 [mg/kg/day]} / (\text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} \times \text{経皮吸収率 [\%]})$$

ここで、経皮吸収率が不明の場合には、通常、国別のガイドライン（例えば 10 %）があり、これを用いればよい。

(vi) 経口推定曝露量及び経口安全係数計算（S 1 3・S 1 4）

上記（v）項目で得られた経皮推定曝露量、手表面積比、及び口移行率に基づいて、手から口への経口推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{経口推定曝露量 [mg/kg/day]} = \text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} \times \text{手表面積比 [\%]} \times \text{口移行率 [\%]}$$

の計算を行う。ここで、上記手表面積比は（手表面積／体表面積）で表され、その値は文献値（例えば、5 [%]）を用いればよい。また、口移行率は仮定値であり、例えば 100 %とする。

また、残留噴霧された化合物によって汚染された食器や食品によって経口曝露することが考えられる場合は、上記の手から口への経口推定曝露量に、食器あるいは食品から口へ経口推定曝露量を加えたものを経口推定曝露量とする必要がある。例えば食器からの経口推定曝露量は、食器内に有害物質が残留する量を示す食器残留量、食器の表面積の総和である食器使用面積、食器からの口移行率に基づいて、

$$\text{経口推定曝露量 [mg/kg/day]} = \text{食器残留量 [mg/m}^2\text{]} \times \text{食器使用面積 [m}^2\text{/day]} \times \text{口移行率 [\%]} / \text{体重 [kg]}$$

の計算をすることによって得られる。ここで、食器残留量は、（平均床残留量×食器汚染率）で表され、この食器汚染率の値は実測値（例えば 9 %）又は仮定値を用いればよい。

次に、経口安全係数は、予め動物実験により調べられた経口毒性に関する無影響量と、先に求められた経口推定曝露量とから算出される。即ち、

経口安全係数＝

経口無影響量 [mg/kg/day] / 経口推定曝露量 [mg/kg/day]

で表される。

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、上記化合物を含む薬剤を空間噴霧したときに、大・中・小粒子 2・8・3、空気 4、床 5、壁 6、及び天井 7 の Fugacity に関する微分方程式を連立して解

き、その解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測するものである。このとき、予測刻み時間幅は、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定される。

5 従って、連立微分方程式を解くときに、化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように噴霧後の化合物のマスバランスが常にチェックされて予測刻み時間幅が可変するので、マスバランスの変動が小さいときには上記予測刻み時間幅が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると予測刻み時間幅が小さく設定されることとなる。つまり、経時的变化を伴うパラメータを含む連立
10 微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に予測刻み時間幅が設定される。これにより、コンピュータで処理する際に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

また、本実施形態における有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、上記予測結果を用いて、薬剤を空間噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を
15 評価するものである。

従って、短時間、かつ精度良く、化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

20 尚、本実施形態では、床5の種類を畳としたが、フローリングの場合も上記と同様の微分方程式を立てればよい。但し、式(31)の床5のFugacity capacity (Z_5)を求める際に、粒子構成溶媒成分含有率(表18参照)を畳からフローリングのものに変更する必要がある。

また、本実施形態では、ルンゲクッタジル法を用いてFugacityを求めたが、
25 他の方法を用いて微分方程式を解くこともできる。しかしながら、ルンゲクッタジル法を用いると、上述した微分方程式のプログラムをBasicで容易に組むことができるので望ましい。また、ルンゲクッタジル法以外で微分方程式を解く際にも、前述のように、予測刻み時間幅を設定することにより、同様の効果を得ることが可能である。

次に、上記第3の実施形態に係る有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法の実施例(Example 6~10)について説明する。

本実施例における化合物の室内挙動シミュレーション方法の評価は、種々の実験条件(Example 6~Example 10)のもとで、予測によって得られた結果と、
5 実際の化合物の室内挙動を測定して得られた実測値とを比較することによって行われた。各Exampleの実験条件は以下に示すとおりである。

Example 6は、空間噴霧された薬剤として、pyrethroidを含むオイルベースの殺虫剤を用いている。室内環境は、日本における典型的なアパートの部屋(3.6[m] × 3.6[m] × 2.4[m])とした。床は木製の床をポリウレタン樹脂で
10 覆ったフローリングの床とし、壁と天井はポリクロロビニルの壁紙で覆われている。窓は、空間噴霧中及び空間噴霧後締め切っておくものとする。空間噴霧は、床から1.6[m]の高さに10秒間均一に噴霧する。その他の条件は、表16から20に記載されたとおりである。

Example 7は、換気率を0.5[1/hour]とした以外はExample 6と同一の条件である。
15

Example 8は、換気率を4.1[1/hour]とした以外はExample 6と同一の条件である。

Example 9は、噴霧して5分後から5分間だけ窓を開けた以外はExample 6と同一の条件である。

Example 10は、噴霧して5分後から2時間だけ窓を開けた以外はExample 6と同一の条件である。
20

上記各Exampleの条件における、空気中の化合物濃度のシミュレーション結果と実測値を図12A及び図12Bに示す。また、Example 6における床及び天井の残留量のシミュレーション結果を図12Cに示す。図において、実線、点
25 線及び破線はシミュレーション結果を示し、プロットは実測値を示している。

上記結果から、本願発明の化合物の室内挙動シミュレーション方法に基づく予測結果は、実測値に非常に近いことがわかる。

(4) 第4の実施形態

本発明の第 4 の実施形態について図面に基づいて説明すれば、以下の通りである。本実施形態に係る有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法は、第 3 の実施形態において、床が繊維の穂立ちを有する敷物で構成されている場合の、化合物の振る舞いを予測するものである。なお、説明の便宜上、上記の
5 第 3 の実施形態の図面に示した部材と同一の部材には同一の符号を付記し、その説明を省略する。ここでは、床の種類をカーペットとした場合について説明し、第 3 の実施形態と異なる部分のみの説明を行う。

まず、カーペットを図 1 3 A、図 1 3 B 及び図 1 3 C に示すようにモデル化する。つまり、カーペットを、基材の上に植設された複数のカーペット繊維（繊維
10 の穂立ち）とそれらの繊維間に存在する空間部分とに分ける。このようなカーペットが床全面に敷かれた部屋で薬剤を空間噴霧すると、粒子がカーペット上に落下し、上記カーペット繊維には薬剤がしみ込むと共に、空間部分には薬剤が溜まることになる。

本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法
15 も、図 1 のフローチャートにしたがうが、S 1 では、1 次条件として、第 3 の実施形態の 1 次条件（表 1 6 ～表 2 0 参照）に、表 2 3 に示すカーペット関連 1 次条件が追加される。尚、カーペットの空間部分の断面積（ A_c ）は、空間部分が室内空気と接触する面積のことである（図 1 3 A、図 1 3 B 及び図 1 3 C 参照）。

表23

カーペット関連 1 次条件	記号	数値例
カーペット		
カーペットの空間部分の断面積	A_c	1.6×10^{-3} [m ² /m ² 床]
カーペット繊維が空間部分の化合物と接触する面積	A_{c5}	0.192 [m ² /m ² 床]
カーペット繊維が化合物と接触する面積	A_{a5}	1.19 [m ² /m ² 床]
製品の性質		
製品中に含まれる溶剤 (Xylene) の含有率	C_{sd}	
製品の希釈倍率	X_{sol}	

尚、表 2 3 における数値例は、図 1 3 A、図 1 3 B 及び図 1 3 C に示す数値に基づいたものである。ここでは、1 つの空間部分を $0.1 \text{ [mm]} \times 0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]}$ 、1 角のカーペット繊維を $2.5 \text{ [mm]} \times 2.5 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]}$ の大きさとしている。また、 $1 \text{ [cm}^2\text{]}$ 中に 16 [個] のカーペット繊維があるものとする。

5 この場合には、各パラメータは、

$$\begin{aligned} A_c &= (0.1 \text{ [mm]} \times 0.1 \text{ [mm]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ &= 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{c5} &= (0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]} \times 4 \text{ [面]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ &= 0.192 \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 10 \quad A_5 &= 1 - A_c \\ &= 1 - 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{a5} &= A_5 + A_{c5} \\ &= 1.19 \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]} \end{aligned}$$

と求めることができる。ここで、 A_5 は $1 \text{ [m}^2\text{]}$ 中のカーペット繊維が室内空気
15 と接する面積のことである。

S 2 における 2 次条件としては、第 3 の実施形態の 2 次条件に、表 2 4 に示す
カーペット関連 2 次条件が追加される。尚、 k_5 及び V_5 は、第 3 の実施形態
(表 2 2 参照) では床中の化合物の移動速度及び床の体積であったが、各々カー
20 ペット繊維内での化合物の移動速度及びカーペットの全繊維の体積に置換することとする。

表24

カーペット関連 2 次条件	記号
一義的要因条件	
空間部分の薬剤の蒸発定数	R_d
空間部分の温度 (T_d) での湿度	H_m
カーペットの全繊維の体積	V_5
製品中の化合物の移動速度	k_c
製品の性質変化定数	a
経時的変化条件	
空間部分の薬剤と空気との間の 化合物の移動係数	D_{c4}
空間部分の薬剤とカーペット繊維との間の 化合物の移動係数	D_{c5}
空間部分の薬剤の体質	V_c
空間部分の薬剤の Fugacity capacity	Z_c

上記表 2 4 に示した一義的要因条件、及び経時的変化条件の算出法を、水性エアゾール使用の場合、即ち粒子構成溶媒が水の場合を例にして以下に説明する。

カーベットの空間部分に入り込んだ薬剤の蒸発定数 (R_d) は、空間部分の断面積 (A_c)、室温 (T)、及び湿度 (H) より、

$$R_d = A_c h (H_m - H) / C_H \quad \dots(46)$$

$$C_H = 0.24 + 0.46H$$

$$h = 3.06 \times 10^{-4} (T - T_d)^{1/3}$$

と表される。ここで、 T_d はカーベットの空間部分の温度 (湿球温度に相当) であり、 H_m は T_d における空間部分の湿度 (湿球温度での飽和湿度に相当) である。尚、 T_d 及び H_m は、室温 (T) 及び湿度 (H) に基づき、前述の「質量基準湿度表」から求めることができる。オイルベースの製品 (エアゾール) の場合、水とオイルの性質を比較し、 R_d に乗じて薬剤の蒸発定数を算出することができるが、オイルの蒸発が遅い場合 $R_d = 0$ としてもよい。

カーベットの全繊維の体積 (V_s) は、拡散係数 (D_c) 及びカーベット繊維が化合物と接触する面積 (A_{a5}) に基づいて、

$$V_s = 2\sqrt{D_c t} A_{a5} \quad \dots(47)$$

として求められる。

製品中の化合物の移動速度 (k_c) は、室内空気における化合物の移動速度を示す k_4 ($= G V_4 / A_4$) を用いて、 $k_4 / 100$ と表される。

カーベットの空間部分の薬剤と空気との間の化合物の移動係数 (D_{c4}) は、上記製品中の化合物の移動速度 (k_c)、室内空気における化合物の移動速度 (k_4)、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、空間部分の断面積 (A_c)、後述の式 (50) で求められる空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c)、及び第 3 の実施形態の式 (30) で求められる空気の Fugacity capacity (Z_4) より、

$$D_{c4} = \frac{1}{1/(k_c A_c L_4 W_4 Z_c) + 1/(k_4 A_c L_4 W_4 Z_4)} \quad \dots(48)$$

と表される。

空間部分の薬剤とカーベット繊維との間の化合物の移動係数 (D_{c5}) は、製品中の化合物の移動速度 (k_c)、拡散係数 (D_c)、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、

カーペット繊維が空間部分における化合物と接触する面積 (A_{c5})、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c)、及び第3の実施形態の式(31)で求められる床のFugacity capacity (Z_5)より、

$$D_{c5} = \frac{1}{1/(k_c A_{c5} L_4 W_4 Z_c) + 1/(k_5 A_{c5} L_4 W_4 Z_5)} \quad \dots(49)$$

- 5 と表される。但し、カーペット繊維内での化合物の移動速度 (k_5) は、(D_c / t)^{0.5}と表される。

空間部分の薬剤の体積 (V_c) は、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、噴霧割合、製品中に含まれる溶剤 (xylene) の含有率 (C_{sd})、製品の希釈倍率 (X_{sol})、及び式(46)で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d) より求まる。

- 10 空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow})、及び製品の性質変化定数 (a) より、

$$Z_c = (e^{-a} K_{ow} + 1 - e^{-a}) C^s / P^s \quad \dots(50)$$

と表される。

- 15 ここで、製品の性質変化定数 (a) は、式(46)で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d)、製品中に含まれる溶剤 (xylene) の含有率 (C_{sd})、及び製品の希釈倍率 (X_{sol}) に基づき算出することができる。即ち、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c) は、

$$Z_c = \{ (\text{製品中の有機溶剤の比率}) K_{ow} + (\text{製品中の水の比率}) \} \times C^s / P^s$$

- 20 とも表され、この式と上記式(50)とを連立することにより、製品の性質変化定数 (a) が算出される。尚、オイルベースの製品 (エアゾール) の場合、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow}) により、第3の実施形態の式
25 (31) で与えられる。

これにより、カーペットの空間部分の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_c) に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned}
\frac{df_c}{dt} V_c Z_c &= \gamma_5 \sum_{i=2,8,3} n_i v_i A_c V_i Z_i f_i / L_{zi} && \text{Deposition}(i) \\
F - \text{change} &+ R_d L_4 W_4 Z_c f_c && V - \text{change} \\
&- D_{c4} (f_c - f_4) && \text{Transference}(4) \\
&- D_{c5} (f_c - f_5) && \text{Transference}(5) \\
&- K_c V_c Z_c f_c && \text{Degradation} \quad \dots(51)
\end{aligned}$$

と表される。また、第3の実施形態における式(42)及び式(41)を、

$$\begin{aligned}
\frac{df_5}{dt} V_5 Z_5 &= \sqrt{D_c / t} A_{a5} Z_5 f_5 && V - \text{change} \\
F - \text{change} &+ \gamma_5 (1 - A_c) \frac{n_{0i}}{L_{zi}} v_i V_i Z_i f_i && \text{Deposition}(i) \\
&- D_{c5} (f_5 - f_c) && \text{Transference}(c) \\
&- D_{45} (f_5 - f_4) && \text{Transference}(4) \\
&- K_5 V_5 Z_5 f_5 && \text{Degradation} \quad \dots(52)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{df_4}{dt} V_4 Z_4 &= -G V_4 Z_4 f_4 && \text{Ventilation} \\
F - \text{change} &- \sum_{i=2,8,3} n_i D_{i4} (f_4 - f_i) && \text{Transference}(i) \\
&- \sum_{j=5}^7 D_{4j} (f_4 - f_j) && \text{Transference}(j) \\
&- K_4 V_4 Z_4 f_4 && \text{Degradation} \\
&- D_{4c} (f_4 - f_c) && \text{Transference}(c) \quad \dots(53)
\end{aligned}$$

5 にそれぞれ置換する。

式(52)において、V-changeの項はカーペット繊維の体積変化(時間と共に増加)を、Deposition(i)の項は粒子の落下に伴う付着を、Transference(c)の項はカーペット繊維と空間部分との間の化合物の移動量を、Transference(4)の項はカーペット繊維と空気との間における化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

10

また、式(53)において、Ventilationの項は化合物の室内からの排出量を、Transference(i)の項は空気と粒子との間の化合物の移動量を、Transference(j)の項は空気と床(カーペット繊維)・天井・壁との間の化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化を、Transference(c)

の項は空気と空間部分との間の化合物の移動量を各々示している。

従って、S 3でのFugacity計算は、第3の実施形態の式(40)、(43)、(44)、上記(51)ないし(53)の8種の微分方程式をルンゲクッタ法で解くことによって行われる。その後のS 4ないしS 17の工程は、第3の実
5 施形態と同様である。

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、床の種類が繊維の穂立ちと穂立ち間の空間部分とを有するカーベットの場合には、大・中・小の3種の粒子、室内空気、床(カーベットの繊維)、天井、及び壁におけるFugacityに関する7種の連立微分方程式に、上記カーベットの空間部分のFugacityの微分方程式を加えて、各Fugacityを計算するものである。
10

これにより、空間部分に薬剤が溜まることから平坦な床の場合とは化合物の振る舞いが異なる場合でも、正確に化合物の挙動を予測することが可能となり、多様なシミュレーションが行える。

15 (5) 第5の実施形態

本発明の第5の実施形態について図面を参照して説明すれば、以下の通りである。

本実施形態にかかる殺虫剤等の薬剤(溶液)に含まれる有害生物防除活性化合物(以下、単に化合物と称する)の室内挙動シミュレーション方法では、例えば
20 蚊を駆除するための電子蚊取器等のような電氣的加熱揮散器を用いて、室内の害虫を駆除するために薬剤を加熱して揮散させた場合の化合物の振る舞いを予測するものである。尚、上記薬剤はピレスロイド系殺虫性化合物及び有機リン系殺虫性化合物を含むすべての殺虫剤等である。

まず、環境を、図15に示すように、3種の凝縮粒子9・10・11、高濃度
25 空気12、中濃度空気13、低濃度空気14、床5、壁6、高濃度天井15、中濃度天井16、及び低濃度天井17の11種の媒体に分類する。

つまり、薬剤を揮散させると、最初はすべての化合物が完全な蒸気(高濃度空気12)として蒸発するが、中濃度空気13で化合物の放出割合(E_T)が蒸気中の化合物の飽和量を越えると凝縮粒子9・10・11が次々と生成される。こ

の凝縮粒子 $9 \cdot 10 \cdot 11$ は、粒子が発生してから消滅するまでの時間に基づいて 3 種に分けられる。上記高濃度空気 12 及び中濃度空気 13 以外のヒトが主に呼吸を行う室内空気を低濃度空気 14 とする。また、高濃度天井 15 は上記凝縮粒子 $9 \cdot 10 \cdot 11$ が吸収される天井部分であり、中濃度天井 16 では中濃度空気 13 が接する天井部分であり、低濃度天井 17 は低濃度空気 14 が接する天井部分である。

上記 11 種の媒体における化合物の Fugacity に関する連立微分方程式を立て、これをルンゲクッタジル法を用いて解くことによって、薬剤を加熱揮散した際の薬剤中の化合物の室内挙動、即ち室内における化合物分布の経時的变化を予測解析する。

このとき、床 5 の種類としては、主に畳、フローリング、及びカーペット（敷物）の 3 種があるので、床種類に応じた微分方程式を立てることとする。本実施形態では、床 5 を畳とした場合について説明する。

図 1 に基づいて、上記化合物の室内挙動予測方法を説明する。本実施形態にかかるシミュレーション方法は、大きくは、室内環境を所定の媒体に分割し、各媒体における化合物の逸散度に関する微分方程式を立てる工程（S1～S2）と、上記微分方程式から、各媒体における化合物の逸散度を求める工程（S3）と、各媒体における化合物の逸散度から、化合物の室内挙動を求める工程（S4）と、微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、室内における化合物のマスバランスの変動に応じて変化させる工程（S21～S35、図 5 参照）と、化合物の室内挙動に基づいて、化合物の人体に対する安全性を評価する工程（S5～S17）に分割できる。

まず、ステップ（以下、S と略称する）1 で 1 次条件を入力する。この 1 次条件は、化合物の物理化学的性質（表 25 参照）、化合物の室内環境挙動性質（表 26 参照）、室内環境（表 27 参照）、及び製品の性質（表 28 参照）である。

表25

化合物の物理化学的性質	記号	数値例
分子量	M_a	302.41 [g/mole]
比重	ρ	1.5×10^6 [g/m ³]
蒸気圧	PS	9.53×10^{-3} [Pa]
水溶解度	CS	1.42×10^{-2} [mole/m ³]
オクタノール／水配分係数	K _{OW}	$10^{4.78}$
融点	T _M	323 [K]

表26

化合物の室内 環境挙動性質	記号	数値例
光・酸化分解半減期 in 凝縮粒子	τ_i (i=9,10,11)	1.08×10^4 [sec]
空気	τ_j (j=12,13,14)	1.08×10^4 [sec]
床・壁・天井	τ_k (k=5,6,15,16,17)	8.64×10^5 [sec]
対空気移動半減期 in 床	τ_{jk} (j=14, k=5)	3.71×10^5 [sec]
天井	τ_{jk} (j=13,14, k=15,16,17)	4.45×10^5 [sec]

表27

室内環境		記号	数値例
オイルベース	部屋の大きさ	V_4	23.3 [m ³]
	床の面積	$L_4 \times W_4$	9.7 [m ²]
	温度	T	298 [K]
	相対湿度	ϕ	60 [%RH]
	絶対湿度	H	1.19×10^{-2} [kg-H ₂ O/kg-dry air]
	換気率	G	0.58 [1/h]
	粒子構成溶媒の室内蒸気圧	P_{∞}	0 [Pa]
	空気拡散係数	D_{air}	8.64×10^{-2} [m ² /h]
	オイル成分の含有率	—	0.46 (昼の場合) 0.04 (フローリングの場合) 0.04 (カーペットの場合)
水ベース	湿球温度	T_d	292.5 [K]
	水の蒸気圧	P_{∞}	1.89×10^3 [Pa]

表28

製品の性質		記号	数値例
オイルベース	化合物含有量	R _a	1.94×10 ⁻² [v/v]
	放出割合	E _T	7.36×10 ⁻⁷ [g/sec]
	凝縮割合	C _r	0.98
	粒子構成溶媒の性質 蒸気圧 分子量 比重	P _d	1.77 [Pa]
		M _d	198.39 [g/mole]
		ρ _d	7.56×10 ⁵ [g/m ³]
	凝縮粒子の直径	d ₀	3.5 [μm]
	高濃度空気の体積	V ₁₂	2 [m ³]
	中濃度空気の体積	V ₁₃	3 [m ³]
	低濃度空気の体積	V ₁₄	18.3 [m ³]
高濃度空気の断面積 中濃度空気の断面積 低濃度空気の断面積	A ₁₂	1.2 [m ²]	
	A ₁₃	0.96 [m ²]	
	A ₁₄	7.48 [m ²]	
水ベース	粒子構成溶媒の性質 蒸気圧	P _d	2.26×10 ³ [Pa]
	分子量	M _d	18 [g/mole]
	比重	ρ _d	1×10 ⁶ [g/m ³]

尚、表 2 8 における A_{12} 、 A_{13} 、及び A_{14} は、室内空気の移動方向（図 1 5 中の矢印）に対する各空気 1 2・1 3・1 4 の断面積を示している。

また、表 2 5 ないし 2 8 における数値例は、夏の典型的な日本のアパートの 6 畳間（9.72 [m²]）を想定し、かつオイルをベースにした薬剤を用いる電氣的加熱揮散器を使用したものである（図 16 A 及び図 1 6 B 参照）。また、電氣的加熱揮散器としては、1 [cm] × 1 [cm] の芯部分（温度が 4 0 5 [K]）と、4 [cm] × 4 [cm] × 0. 5 [cm] のヒータ部分（温度が 3 7 3 [K]）と、薬剤が封入された容器（温度 3 0 3 [K]）とからなるものとしている。また、表 2 8 における化合物含有量（ R_a ）の数値例は、凝縮直後の粒子の体積に対する化合物の体積を示している。

次に、上記 1 次条件を用いて 2 次条件を計算で求める（S 2）。この 2 次条件には、1 次条件のみで求まり、時間的に変化しない一義的要因条件（表 2 9 参照）と、時間的な変化を伴う経時的変化条件（表 3 0 参照）とがある。これらの計算は後で詳細に説明する。

表29

一義的要因条件	記号
凝縮粒子の浮遊数	n_i ($i=9,10,11$)
凝縮粒子の蒸発定数	α
気体状態での薬剤放出量	E_v
空気中の化合物の拡散係数	D_{ca}
床・壁・天井の表面積	A_k ($k=5,6,15,16,17$)
床・壁・天井の拡散係数	D_c
空気の速度	V_f
Fugacity capacity of 凝縮粒子	Z_i ($i=9,10,11$)
空気	Z_j ($j=12,13,14$)
床・壁・天井	Z_k ($k=5,6,15,16,17$)
分解定数 of 凝縮粒子	K_i ($i=9,10,11$)
空気	K_j ($j=12,13,14$)
床・壁・天井	K_k ($k=5,6,15,16,17$)

表30

経時的変化条件	記号
凝縮粒子の直径	d_i ($i=9,10,11$)
化合物の移動速度 in 凝縮粒子 空気 床・壁・天井	k_i ($i=9,10,11$) k_j ($j=12,13,14$) k_k ($k=5,6,15,16,17$)
凝縮粒子と空気との間の 化合物の移動係数 空気と床・壁・天井との間の 化合物の移動係数	D_{i13} ($i=9,10,11$) D_{jk} ($j=12,13,14,$ $k=5,6,15,16,17$)
凝縮粒子の体積 床・壁・天井の体積	V_i ($i=9,10,11$) V_k ($k=5,6,15,16,17$)

上記2次条件を用いて11種のFugacityを計算する(S3)。即ち、3種の凝縮粒子9・10・11と、3種の空気12・13・14と、床5と、壁6と、3種の天井15・16・17とに関する11種の微分方程式を連立し、これをルンゲクッタジル法で解き、11種のFugacityを経時的に算出する。ここで、微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅(微小時間単位)は、化合物のマスバランスの変動に合わせて自動的に可変して設定されるようになっている。

S4で、上記算出された低濃度空気14のFugacity(f_{14})を用いて化合物の経時的室内空气中濃度を、床5のFugacity(f_5)を用いて化合物の床残留量を各々算出する。

S5で、薬剤を吸入した場合における安全性評価を行うか否かを判断し、吸入における安全性評価を行う場合には、上記経時的室内空气中濃度を用いて、汚染された空気を吸入することによって、どの程度曝露されるかを示す吸入推定曝露量を計算する(S6)。その後、吸入推定曝露量に基づいて吸入安全係数を算出する(S7)。S8で、国毎に定められた基準値と上記吸入安全係数とを比較し、基準値に対して吸入安全係数が上回れば「安全性に問題なし」との判断を下す。一方、S8で基準値に対して吸入安全係数が下回れば、「安全性に問題あり」との判断を下し、S1へ戻って例えば、化合物の変更、製剤処方の変更、あるいは使用条件の変更等の1次条件の変更を検討する。

また、上記S5で吸入における安全性評価でない場合には、薬剤が付着した床5に接触することによって皮膚がどの程度曝露されるかを示す経皮推定曝露量を計算する(S9)。その後、S10で経皮における安全性評価を行うか否かを判断し、経皮における安全性評価を行う場合には、上記経皮推定曝露量に基づいて経皮安全係数を算出する(S11)。S12で、吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経皮安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S12で安全性に問題がある場合にはS1に戻って1次条件の変更を検討する。

また、上記S10で経皮における安全性評価でない場合には、S13で上記経皮推定曝露量に基づいて、手等に付着した薬剤が口から入ることによってどの程度曝露されるかを示す経口推定曝露量を計算し(S13)、続いて、この経口推

定曝露量に基づいて経口安全係数を算出する（S 1 4）。この経口曝露は、特に
 幼児が薬剤の付着した手を口に入れることによって起こる可能性がある。S 1 5
 で吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経口安全
 係数とを比較することによって安全性を評価する。S 1 5で安全性に問題がある
 5 場合にはS 1に戻って1次条件の変更を検討する。

最後に、S 8、S 1 2、あるいはS 1 5において、安全であると判断された場
 合には総合的な安全性の評価を行う。ここでは、先に求められた吸入安全係数、
 経皮安全係数、及び経口安全係数の各々の逆数の和を求めて、得られた値を逆数
 にすることにより、総合安全係数を求める（S 1 6）。この総合安全係数を基準
 10 値と比較することによって、先の安全性評価と同様の評価を行う（S 1 7）。

次に、上記S 2～S 4、S 6、S 7、S 9、S 1 1、S 1 3、及びS 1 4の工
 程について詳細に説明する。

(i) 2次条件計算（S 2）

上記表 2 9 に示した一義的要因条件、及び表 3 0 に示した経時的変化条件の計
 15 算を説明する。

凝縮粒子 9・1 0・1 1 は、時間 t_1 の間に連続して生成され、高濃度天井 1
 5 に吸収される。具体的には揮散後から時間 $t_1/3$ までの間に凝縮粒子 9 が存
 在し、時間 $t_1/3$ 後に凝縮粒子 1 0 が生成され、時間 $2t_1/3$ 後に凝縮粒子
 1 1 が生成される。このときの凝縮粒子 9・1 0・1 1 の浮遊数 ($n_i, i=9, 10,$
 20 11) は、発生から吸収まで一定であり、化合物の比重 (ρ)、化合物含有量 (R_a)、
 放出割合 (E_T)、凝縮割合 (C_r)、及び凝縮粒子 9・1 0・1 1 の最初
 の直径 (d_0) より、次のように表される。ここで、 G は換気率である。

$$\left. \begin{aligned} n_i &= \left(\frac{dn_T}{dt} \right) \frac{t_1}{3} \\ \frac{dn_T}{dt} &= E_T C_r / \left(\frac{\pi}{6} d_0^3 R_a \rho \right) - G \end{aligned} \right\} \quad \dots(54)$$

凝縮粒子 9・1 0・1 1 の蒸発定数 (α) は、粒子の表面温度 (T_d)、粒子
 25 構成溶媒の性質 (蒸気圧 P_d 、分子量 M_d 、比重 ρ_d)、及び室内環境 (空気拡散
 係数 D_{air} 、蒸気圧 P_∞ 、室温 T_∞) より、以下のように定義される。但し、 R

は気体定数である。

$$\alpha = \frac{4D_{\text{air}}M_d}{R\rho_d} \left(\frac{P_d}{T_d} - \frac{P_\infty}{T_\infty} \right) \quad \dots(55)$$

尚、上記表 2 7 及び表 2 8 の上部は加熱揮散エアゾールがオイルベースの場合を例示し、この場合には T_∞ (粒子から遠く離れた箇所の温度) や T_d は室温 (T) とし、 P_∞ (粒子から遠く離れた箇所のオイルの蒸気圧) はゼロとする。

また、加熱揮散エアゾールが水ベースの場合には、式 (5 5) の P_d 、 M_d 、 ρ_d 、 T_d 、及び P_∞ は水の性質に基づく値に変更する必要がある。具体的には、室温 (T) が 2 9 8 [K] (= 2 5 °C)、相対湿度が 6 0 [%RH] 時の上記要因値を表 2 7 及び表 2 8 の下部に例示している。

尚、 T_d は室温 (T) 及び絶対湿度 (H) に基づき、化学機械の理論と計算 (第 2 版) (亀井三郎編、産業図書) 等に記載される「質量基準湿度表」から求めることができる。また、 P_d と P_∞ は、以下の式より算出可能である。

$$\log_{10} P_d = 10.23 - 1750 / (T_d - 38)$$

$$\log_{10} P_\infty = 8.23 - 1750 / (T - 38) + \log_{10} \psi$$

ここで、 ψ は室内の相対湿度である。

高濃度空気 1 2 への薬剤放出量 (E_v) は、化合物の分子量 (M_a)、放出割合 (E_T)、及び凝縮割合 (C_r) より、以下のように表される。

$$E_v = E_T(1 - C_r)/M_a \quad \dots(56)$$

床 5、壁 6、高濃度天井 1 5、中濃度天井 1 6、及び低濃度天井 1 7 の表面積 ($A_k, k=5, 6, 15, 16, 17$) は、それぞれ部屋の大きさ (V_4)、及び床の面積 ($L_4 \times W_4$) より求められる。

室内空気の流れ速度 (v_f) は、部屋の大きさ (V_4)、換気率 (G)、及び室内空気の移動方向に対する部屋の断面積 (A_{14}) を用いて、次のようにして求められる。

$$v_f = G \frac{V_4}{A_{14}} \quad \dots(57)$$

凝縮粒子 9・10・11 の Fugacity capacity ($Z_i, i=9, 10, 11$) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、融点 (T_m)、及び粒子の表面温度 (T_d) より、

$$Z_i = \frac{6 \times 10^6}{P_L^s R T_d} \dots (58)$$

$$P_L^s = P^s \exp\{6.79(T_M/T_d - 1)\}$$

と表される。ここでは、液体状態の化合物の蒸気圧 (P_L^s) を T_M と T_d を用いて算出しているが、 T_M が得られない場合、 P_L^s は固体状態の化合物の蒸気圧 (P^s) と同じとしてよい。

- 5 空気 12・13・14 の Fugacity capacity ($Z_j, j=12,13,14$) は、室温 (T) より、次のように表される。

$$Z_j = \frac{1}{RT} \dots (59)$$

- 10 床 5、壁 6、及び天井 15・16・17 の Fugacity capacity ($Z_k, k=5, 6, 15, 16, 17$) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow})、及び床 5、壁 6、及び天井 15・16・17 を構成する材質のオイル成分の含有率 ($\rho_k, k=5, 6, 15, 16, 17$) より、

$$Z_k = \rho_k K_{ow} C^s / P^s \dots (60)$$

と表される。

- 15 11 種の媒体中では主に光・酸化分解反応が生じており、凝縮粒子 9・10・11 の分解定数 ($K_i, i=9,10,11$) と、空気 12・13・14 の分解定数 ($K_j, j=12,13,14$) と、床 5、壁 6、及び天井 15・16・17 の分解定数 ($K_k, k=5, 6, 15, 16, 17$) とは、各々の光・酸化分解半減期 (τ_i)、(τ_j)、(τ_k) を用いて定義される。

$$\left. \begin{aligned} K_i &= \frac{0.693}{\tau_i} \\ K_j &= \frac{0.693}{\tau_j} \\ K_k &= \frac{0.693}{\tau_k} \end{aligned} \right\} \dots (61)$$

- 20 尚、 τ_i 、 τ_k は入手できない場合が多いが、そのときは居住者の安全性確保の観点から K_i や K_k をゼロとすればよい。空気中の化合物の τ_j が入手できない

場合は、Atmospheric Oxidation program (Atkinson et al., 1984, Chem. Rev. Vol. 84, pp437-470)を用いて、化合物の構造式から算出することも可能である。

5 時間 t での凝縮粒子 9・10・11 の直径 ($d_i, i=9, 10, 11$) は、粒子の体積が粒子構成溶媒成分の蒸発により時間と共に小さくなるので、粒子構成溶媒成分が蒸発している間については凝縮直後 ($t=0$) の粒子の直径 (d_0)、及び式 (55) より求まる蒸発定数 (α) を用いて示される。

$$d_i = \sqrt{d_0^2 - 2\alpha t} \quad \dots\dots(62)$$

10 凝縮粒子 9・10・11 と中濃度空気 13 との間の化合物の移動係数 (D_{i13}) は、式 (62) で求まる凝縮粒子 9・10・11 の直径 (d_i)、式 (57) で求まる室内空気速度 (v_f)、式 (58) で求まる凝縮粒子 9・10・11 の Fugacity capacity (Z_i)、及び式 (59) で求まる中濃度空気 13 の Fugacity capacity (Z_{13}) より、

$$D_{i13} = \frac{1}{1/(k_i A_i Z_i) + 1/(k_{13} A_i Z_{13})} \quad \dots\dots(63)$$

15 となる。ここで、 $A_i (= \pi d_i^2)$ は粒子の表面積であり、 $k_{13} (= v_f + v_i)$ は中濃度空気 13 中の化合物の移動速度であり、 $k_i (= v_f / 100)$ は粒子中の化合物の移動速度である。尚、 v_i は凝縮粒子 9・10・11 の浮遊速度であり、電氣的加熱揮散器の熱による流れ、重力、及び空気抵抗に支配されているので、流体力学を利用して求めることができる。

20 中濃度空気 13 と天井 15・16 との間、あるいは低濃度空気 14 と床 5、壁 6、及び低濃度天井 17 との間の化合物の移動係数 (D_{jk}) は、天井 15・16・17 における対空気移動半減期 (τ_{jk})、空気 12・13・14 の体積 ($V_j, j=12, 13, 14$)、後述の式 (66) で求まる床・壁・天井の体積 (V_k)、式 (59) で求まる空気 12・13・14 の Fugacity capacity (Z_j)、式
25 (60) で求まる床・壁・天井の Fugacity capacity (Z_k) より、

$$D_{jk} = \frac{0.693}{\tau_{jk} \{1/(V_j Z_j) + 1/(V_k Z_k)\}} \quad \dots(64)$$

$$D_{jk} = \frac{1}{1/(k_j A_{jk} Z_j) + 1/(k_k A_{jk} Z_k)} \quad \dots(64')$$

となる。ここで、空気 1 2 ・ 1 3 ・ 1 4 の全体積 $V_{12} + V_{13} + V_{14}$ は、部屋の体積 (V_4) と等しくなる。

また、上記移動係数 (D_{jk}) は、空気中の化合物の移動速度 (k_j)、及び内
5 装材 (床 5 ・ 壁 6 ・ 天井 1 5 ・ 1 6 ・ 1 7) 中の化合物の移動速度 (k_k) を用
いて、上記式 (6 4') に示す式によっても求めることが可能である。

尚、式 (6 4) における対空気移動半減期 (τ_{jk}) は実測することが難しく、
また様々な条件下で値が異なるため、正確な値を求めることが困難である。これ
に対して、式 (6 4') におけるすべてのパラメータは、測定を必要とせず、計
10 算によって容易に求めることができる。例えば、内装材中の化合物の移動速度
(k_k) は、化合物の拡散係数 (D_c) を用いて、 $(D_c/t)^{0.5}$ と計算され、
 A_{jk} は各空気 1 2 ・ 1 3 ・ 1 4 と各内装材 (床 5 ・ 壁 6 ・ 天井 1 5 ・ 1 6 ・ 1
7) との接触面積から求めることができる。尚、 D_c は空気中の化合物の拡散係
数 (D_{ca}) に 10^{-9} を乗じて求めることが可能であり、 D_{ca} は化合物の性質
15 (構造式、分子量等) から例えば、Wike and Lee Method (Handbook of C
hemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill Book Company,
1982) に従って、算出可能である。従って、移動係数 (D_{jk}) は、式 (6 4)
よりも式 (6 4') で求める方が好ましい。

凝縮粒子 9 ・ 1 0 ・ 1 1 の体積変化 (dV_i/dt) は、式 (6 2) より求ま
20 る粒子の直径 (d_i)、及び蒸発定数 (α) を用いて、

$$\frac{dV_i}{dt} = -\frac{\pi}{2} \alpha d_i \quad \dots(65)$$

と表される。つまり、凝縮粒子 9 ・ 1 0 ・ 1 1 は、粒子構成溶媒成分が時間と共に蒸発して、その体積 ($V_i, i=9, 10, 11$) が減少する。

床 ・ 壁 ・ 天井の体積 ($V_k, k=5, 6, 15, 16, 17$) は、薬剤が加熱揮散される前
25 の床 5、壁 6、及び天井 1 5 ・ 1 6 ・ 1 7 をそれぞれ薄い膜状のものと考え、薬

剤がそれらの膜にしみ込むにつれてその厚みが増して体積が増加するものと考え
ると、上記床・壁・天井の表面積 (A_k)、及び床・壁・天井中の化合物の拡散
係数 (D_c) より、次のように示される。

$$V_k = 2\sqrt{D_c t} A_k \quad \dots(66)$$

5 (ii) Fugacity計算 (S 3)

凝縮粒子 9・10・11 中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_i) に関する
微分方程式として、

$$\frac{df_i}{dt} V_i Z_i = \frac{\pi}{2} \alpha d_i Z_i f_i - D_{i13} (f_i - f_{13}) - K_i V_i Z_i f_i \quad \dots(67)$$

F - change V - change Transference(13) Degradation

と表される。ここで、*v-change*の項は凝縮粒子の体積変化（時間と共に減少）
10 を、*Transference(13)*の項は凝縮粒子 9・10・11 と中濃度空気 13 と
の間の化合物の移動量を、*Degradation*の項は凝縮粒子 9・10・11 中での
化合物の光・酸化分解量 ($K_i V_i Z_i$ は分解速度量を示す) を各々表している。

尚、高濃度天井 15 に凝縮粒子 9・10・11 が吸収された場合、Fugacity
(f_i) はすぐに消滅し、後述の Fugacity (f_{15}) に加算されることになる。

15 高濃度空気 12 中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_{12}) に関する微分方
程式として、

$$\frac{df_{12}}{dt} V_{12} Z_{12} = E_v + v_f A_{12} (Z_{13} f_{13} - Z_{12} f_{12}) - K_{12} V_{12} Z_{12} f_{12} \quad \dots(68)$$

F - change Emission Transference(f) Degradation

と表される。ここで、*Emission*の項は完全な蒸気としての化合物の放出量を、
20 *Transference(j)*の項は中濃度空気 13 との化合物の移動量を、*Degradatio*
*n*の項は化合物の光・酸化分解量 ($K_{12} V_{12} Z_{12}$ は分解速度量を示す) をそれ
ぞれ示している。

中濃度空気 13 中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_{13}) に関する微分方
程式として、

$$\frac{df_{13}}{dt} V_{13} Z_{13} = v_f \{ A_{12} Z_{12} f_{12} - (A_{12} + A_{13}) Z_{13} f_{13} + A_{13} Z_{14} f_{14} \} \quad \dots (69)$$

F – change

Transference(j)

$$-\sum_{i=9}^{11} n_i D_{i13}(f_{13} - f_i) - \sum_{k=15}^{16} D_{13k}(f_{13} - f_k)$$

Transference(i)
Transference(k)

$$Transference(i)$$
$$Transference(k)$$

$$-K_{13}V_{13}Z_{13}f_{13}$$

Degradation

と表される。ここで、Transference(j)の項は高濃度空気 1 2 及び低濃度空気 1 4 との化合物の移動量を、Transference(i)の項は凝縮粒子 9・10・11 との化合物の移動量を、Transference(k)の項は天井 1 5・1 6 との化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光・酸化分解量 ($K_{13} V_{13} Z_{13}$ は分解速度量を示す) をそれぞれ示している。

低濃度空気 1.4 中の化合物の振る舞いは、Fugacity ($f_{1.4}$)に関する微分方程式として、

$$\frac{df_{14}}{dt} V_{14} Z_{14} = v_f \{A_{13} Z_{13} f_{13} - (A_{13} + A_{14}) Z_{14} f_{14}\} \quad \dots (70)$$

F – change

Transference(j) & Ventilation

$$-\sum_{k=5}^6 D_{14k}(f_{14} - f_k) - D_{1417}(f_{14} - f_{17})$$

Transference(*k*)
Transference(17)

$$Transference(k)$$

Transference(17)

$$-K_{14}V_{14}Z_{14}f_{14}$$

Degradation

と表される。ここで、Transference(j)&Ventilationの項は化合物の中濃度空気13との移動量及び室内からの排出量を、Transference(k)の項は床5・壁6との化合物の移動量を、Transference(17)の項は低濃度天井17との化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光・酸化分解量($K_{14} V_{14} Z_{14}$ は分解速度量を示す)をそれぞれ示している。

床 5 及び壁 6 中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_5)、(f_6) に関する微分方程式として、それぞれ、

$$\frac{df_5}{dt} V_5 Z_5 = -\sqrt{D_c/t} A_5 Z_5 f_5 - D_{145}(f_5 - f_{14}) \quad \dots(71)$$

F - change V - change Transference(14)

$$- K_5 V_5 Z_5 f_5$$

Degradation

$$\frac{df_6}{dt} V_6 Z_6 = -\sqrt{D_c/t} A_6 Z_6 f_6 - D_{146}(f_6 - f_{14}) \quad \dots(72)$$

F - change V - change Transference(14)

$$- K_6 V_6 Z_6 f_6$$

Degradation

5 — — — — — と表される。ここで、各式の *v-change* の項は床 5 あるいは壁 6 の体積変化（時間と共に増加）を、*Transference(14)* の項は床 5 あるいは壁 6 との化合物の移動量を、*Degradation* の項は化合物の光・酸化分解量（ $K_5 V_5 Z_5$ あるいは $K_6 V_6 Z_6$ は分解速度量を示す）を示している。

10 高濃度天井 15、中濃度天井 16、及び低濃度天井 17 中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_{15})、(f_{16})、(f_{17})、に関する微分方程式として、それぞれ、

$$\frac{df_{15}}{dt} V_{15} Z_{15} = -\sqrt{D_c/t} A_{15} Z_{15} f_{15} - D_{1315}(f_{15} - f_{13}) \quad \dots(73)$$

F - change V - change Transference(13)

$$- K_{15} V_{15} Z_{15} f_{15}$$

Degradation

$$\frac{df_{16}}{dt} V_{16} Z_{16} = -\sqrt{D_c/t} A_{16} Z_{16} f_{16} - D_{13\ 16} (f_{16} - f_{13}) \quad \dots(74)$$

F - change V - change Transference(13)

$$-K_{16} V_{16} Z_{16} f_{16}$$

Degradation

$$\frac{df_{17}}{dt} V_{17} Z_{17} = -\sqrt{D_c/t} A_{17} Z_{17} f_{17} - D_{14\ 17} (f_{17} - f_{14}) \quad \dots(75)$$

F - change V - change Transference(14)

$$-K_{17} V_{17} Z_{17} f_{17}$$

Degradation

と表される。ここで、各式のV-changeの項は天井15・16・17の体積変化
(時間と共に増加)を、Transference(13)の項は高濃度天井15あるいは中
濃度天井16と中濃度空気13との化合物の移動量を、Transference(14)の
項は低濃度天井17と低濃度空気14との化合物の移動量を、Degradationの
項は化合物の光・酸化分解量 ($K_{15} V_{15} Z_{15}$ 、 $K_{16} V_{16} Z_{16}$ 、あるいは $K_{17} V_{17} Z_{17}$ は分解速度量を示す) をそれぞれ示している。

なお、床 (k=5)、壁 (k=6)、天井 (k=15,16,17) には、所定の割合で以
下のFugacity (f_a) を付加することにより精度を向上させることができる。

$$f_a = n_i V_{ia} Z_i f_{ia} / V_k / Z_k \quad \dots(76)$$

ここで、 V_{ia} 、 f_{ia} はそれぞれ、凝縮粒子が内装材に付着する直前の粒子の体積及びFugacityを意味する。

上記式 (67) ないし (75) の11種の微分方程式を連立してルンゲクッタ
法にて解くことにより、Fugacity ($f_5, f_6, f_9 \sim f_{17}$) を算出する。

この連立微分方程式を解くときに、微小時間単位である予測刻み時間幅 (dt) を設定する必要がある。つまり、予測刻み時間幅は、まず時間 (t_0) での連立微分方程式の解を求め、次に予測刻み時間幅を加えた ($t_0 + dt$) 時間での微分方程式の解を求めることであり、予測刻み時間幅を次々と加えながら解を得ることによって経時的に変化するFugacityが求められる。理論的には、上記予測刻み時間幅の設定時間が小さければ小さいほど正確な解を得ることができる

が、計算時間が非常に長くなる。逆に、設定時間が大き過ぎると解が発散して、解に誤りが生じ易くなる。

そこで、本願発明では、非常に大きな変化が薬剤に起こるときには予測刻み時間幅が小さく設定されるように、逆に大きな変化がない場合には予測刻み時間幅が大きく設定されるようにしている。

具体的には、薬剤の投入量と得られた解とが合致するように常にマスバランスを確認し、マスバランスが大きく変動しない場合には予測刻み時間幅を大きく、マスバランスが変動し始める場合には予測刻み時間幅を小さくする。例えば、マスバランスの変動を±5%の精度に設定すると、

10 化合物投入量 / (存在量 + 分解量 + 排出量) = 0.95 ~ 1.05
の関係が常に満たされるように、即ちマスバランスの変動が±5%の範囲内に納まるように予測刻み時間幅を絶えず設定する。

ここで、上記化合物投入量は、化合物含有量 (R_a) 及び放出割合 (E_T) より求められる。また、存在量は、連立微分方程式で11種の媒体中の経時的な化合物量が求められるので、それらを合計して以下のように算出する。

$$\left. \begin{aligned} \text{存在量} &= \sum_{i=9}^{11} n_i V_i Z_i f_i + \sum_{k=5}^6 f_k V_k Z_k + \sum_{k=12}^{17} f_k V_k Z_k \\ \text{分解量} &= \sum_{i=9}^{11} n_i K_i V_i Z_i f_i + \sum_{k=5}^6 K_k f_k V_k Z_k + \sum_{k=12}^{17} K_k f_k V_k Z_k \\ \text{排出量} &= v_f A_{14} Z_{14} f_{14} \end{aligned} \right\} \dots (77)$$

分解量及び排出量も上記に示す通りである。

図5のフローチャートに基づいて、この予測刻み時間幅 (dt) の設定方法を説明する。

20 まず、予測刻み時間幅 (dt) の初期値を入力し (S21)、次にマスバランスの差の上限である上限設定値 (例えば0.1 [%])、及びマスバランスの差の下限である下限設定値 (例えば 10^{-6} [%]) を入力する (S22)。その後、 $t = t_0$ のFugacity及びマスバランスを計算し (S23・S24)、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のFugacity及びマスバランスを計算する (S25・S26)。

マスバランスの変動が±5%の範囲内であるかどうかを確認し(S27)、マスバランスの変動が±5%の範囲内であれば、 $t = t$ (あるいは t_0)のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$)のマスバランスとの差が上限設定値以上であるか否かを判断する(S28)。S28で上限設定値以上であれば、
5 予測刻み時間幅(dt)を小さくした方が解が正確になるので、予測刻み時間幅(dt)を1/2倍して設定を変更し(S29)、S28で上限設定値より小さければS30で $t = t$ (あるいは t_0)のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$)のマスバランスとの差が下限設定値以下であるか否かを判断する。

10 S30でマスバランスの差が下限設定値以下であれば、予測刻み時間幅(dt)を大きくしても解には影響を及ぼさないので、予測刻み時間幅(dt)を2倍して設定を変更し(S31)、次に、S31で変更した予測刻み時間幅(dt)が予測刻み時間幅(dt)の最大値(例えば、0.1 [hour])以下であるか否かを判断する(S32)。S32で予測刻み時間幅(dt)が最大値以下
15 の場合には、解は発散しないので、S31で設定した予測刻み時間幅(dt)を用いる。一方、S32で予測刻み時間幅(dt)が最大値より大きい場合には解が発散する可能性があるので、予測刻み時間幅(dt)を最大値に設定し直す(S33)。また、上記S30において、マスバランスの差が下限設定値よりも大きければ、即ち下限設定値と上限設定値との間にあれば予測刻み時間幅(dt)は変更せずに計算を続ける。
20

上記S29、S30、S32、あるいはS33の工程を経ると、S25へ戻って再び計算を行い、目的の時間に達するまで上記工程を繰り返す。

一方、S27において、マスバランスの変動が±5%の範囲を越えると、マスバランスの変動が大きいので、変動が±5%の範囲内の場合と比較して予測刻み
25 時間幅(dt)を小さくして計算を行った方がよい。従って、一旦計算を中止し(S34)、下限設定値を小さく設定し直してから(S35)、S23の工程へ戻る。

このように、予測刻み時間幅を一定値にすることなく、マスバランスの変動をチェックしながら予測刻み時間幅を可変設定することにより、正確に、かつ効率

よくFugacityを算出することが可能となる。

(iii) 経時的室内空气中濃度及び床残留量算出 (S 4)

5 化合物の経時的室内空气中濃度は、上記(ii)項目で求められた低濃度空気14のFugacity (f_{14}) にFugacity capacity (Z_{14}) を掛けることによって算出される。低濃度空気14中の濃度を用いる理由は、室内の大部分が低濃度空気14で満たされており、ヒトが低濃度空気14を吸入する可能性が最も高いからである。尚、必要に応じて他濃度の空气中濃度を用いてもよい。

化合物の床残留量は、床のFugacity (f_5) にFugacity capacity (Z_5) を掛けることによって算出される。

10 (iv) 吸入推定曝露量及び吸入安全係数計算 (S 6・S 7)

前述した経時的室内空气中濃度は、例えば図3Aに示すような曲線を描く。この濃度曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積濃度を求め(図3B参照)、この値から平均室内空气中濃度を算出する。尚、上記特定期間は目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

次に、上記平均室内空气中濃度、呼吸量、及び曝露時間に基づいて、吸入推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{吸入推定曝露量 [mg/kg/day]} = \text{平均室内空气中濃度 [mg/m}^3\text{]} \times \\ \text{呼吸量 [m}^3\text{/kg/min]} \times \text{曝露時間 [min/day]}$$

20 の計算を行う。ここで、上記呼吸量は文献値あるいは実測値を用いればよい。また、大人と子供とに呼吸量を分けて考慮すれば、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。また、吸入された有害物質が体内に全て吸収されず、呼吸によって一部排出される場合は、吸入比率を考慮することにより、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。

25 吸入安全係数は、予め動物実験により調べられた吸入毒性に関する無影響量と、先に求められた吸入推定曝露量とから算出される。即ち、

吸入安全係数＝

$$\text{吸入無影響量 [mg/kg/day]} / \text{吸入推定曝露量 [mg/kg/day]}$$

で表される。

(v) 経皮推定曝露量及び経皮安全係数計算 (S 9・S 11)

前述の床残留量は、例えば図4Aに示すような曲線を描く。この残留量曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積残留量を求め (図4B参照)、この値から平均床残留量を算出する。尚、上記特定期間は、目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

次に、平均床残留量、皮膚付着率、接触面積、及び体重に基づいて、経皮推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} = (\text{平均床残留量 [mg/m}^2\text{]} \times$$

$$\text{皮膚付着率 [\%]} \times \text{接触面積 [m}^2\text{/day]}) / \text{体重 [kg]}$$

の計算を行う。ここで、上記接触面積は文献値 (例えば、4 [m²/day]) を用いればよい。また、皮膚付着率は化合物の存在する床5に皮膚が接触した場合に、化合物が皮膚に付着する割合のことであり、この値は文献値あるいはモデル実験値を用いればよい。

上記皮膚付着率のモデル実験方法は、次の通りである。幼児が床に接する圧力と同様の圧力で、デニムの布 (8cm×10cm) の上に重し (8cm×8cm×8cm; 4.2 kg) を載せ、幼児が動くような速さ (120cm/15sec) でデニムの布を床上で引っ張る。このデニムと床を分析することにより、デニム及び床に含有される化合物を算出し、その比から皮膚付着率を求める。尚、この方法で得た皮膚付着率は、実際に手を床に押し付けて、手と床の分析値から求めた皮膚付着率と同等か、あるいは若干高めであることが確認されており、居住者の曝露評価を行う上でこのモデル実験方法は有用であることが確認された。

次に、経皮安全係数は、予め動物実験により調べられた経皮毒性に関する無影響量と、先に求められた経皮推定曝露量とから算出される。即ち、

経皮安全係数

$$= \text{経皮無影響量 [mg/kg/day]} / \text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]}$$

で表される。

しかしながら、一般に経皮無影響量はあまり求められておらず、文献値も多くない。従って、経皮安全係数を、経皮推定曝露量と、文献値が多数存在する経口

無影響量及び経皮吸収率を用いて、以下の式に基づいて求める方がより正確な値を求めることができる。

$$\text{経皮安全係数} = \text{経口無影響量} [\text{mg/kg/day}] / (\text{経皮推定曝露量} [\text{mg/kg/day}] \times \text{経皮吸収率} [\%])$$

- 5 ここで、経皮吸収率が不明の場合には、通常、国別のガイドライン（例えば 10%）があり、これを用いればよい。

(vi) 経口推定曝露量及び経口安全係数計算 (S 13・S 14)

上記 (v) 項目で得られた経皮推定曝露量、手表面積比、及び口移行率に基づいて、経口推定曝露量を求める。即ち、

$$10 \quad \text{経口推定曝露量} [\text{mg/kg/day}] = \text{経皮推定曝露量} [\text{mg/kg/day}] \times \text{手表面積比} [\%] \times \text{口移行率} [\%]$$

の計算を行う。ここで、上記手表面積比は（手表面積／体表面積）で表され、その値は文献値（例えば、5 [%]）を用いればよい。また、口移行率は仮定値であり、例えば 100%とする。

- 15 また、残留噴霧された化合物によって汚染された食器や食品によって経口曝露することが考えられる場合は、上記の手から口への経口推定曝露量に、食器あるいは食品から口へ経口推定曝露量を加えたものを経口推定曝露量とする必要がある。例えば食器からの経口推定曝露量は、食器内に有害物質が残留する量を示す食器残留量、食器の表面積の総和である食器使用面積、食器からの口移行率に基づいて、

$$20 \quad \text{経口推定曝露量} [\text{mg/kg/day}] = \text{食器残留量} [\text{mg/m}^2] \times \text{食器使用面積} [\text{m}^2/\text{day}] \times \text{口移行率} [\%] / \text{体重} [\text{kg}]$$

- 25 の計算をすることによって得られる。ここで、食器残留量は、（平均床残留量×食器汚染率）で表され、この食器汚染率の値は実測値（例えば 9%）又は仮定値を用いればよい。

次に、経口安全係数は、予め動物実験により調べられた経口毒性に関する無影響量と、先に求められた経口推定曝露量とから算出される。即ち、

$$\text{経口安全係数} = \text{経口無影響量} [\text{mg/kg/day}] / \text{経口推定曝露量} [\text{mg/kg/day}]$$

で表される。

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、まず環境を、発生と消滅に応じて3種に分けた凝縮粒子9・10・11と、化合物濃度に応じて3種に分けた高濃度空気12、中濃度空気13、及び低濃度空気14と、床5と、壁6と、化合物濃度に応じて3種に分けた高濃度天井15、中濃度天井16、及び低濃度天井17とに分け、これらにおけるFugacityに関する微分方程式を連立して解くことによって、上記化合物を含む薬剤を加熱して揮散させたときの上記化合物の室内挙動を予測するものである。このとき、予測刻み時間幅を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、加熱揮散後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解いている。

従って、連立微分方程式を解くときに、化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように加熱揮散後の化合物のマスバランスが常にチェックされて予測刻み時間幅が可変するので、マスバランスの変動が小さいときには上記予測刻み時間幅が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると予測刻み時間幅が小さく設定されることとなる。つまり、経時的変化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に予測刻み時間幅が設定される。これにより、コンピュータで処理する際に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

また、本実施形態における有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、上記予測結果を用いて、薬剤を加熱揮散した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価するものである。

従って、短時間、かつ精度良く、化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

尚、本実施形態では、床5の種類を畳としたが、フローリングの場合も上記と同様の微分方程式を立てればよい。但し、式(60)の床5のFugacity capacity (Z_5)を求める際に、粒子構成溶媒成分含有率(表27参照)を畳からフ

ローリングのものに変更する必要がある。

また、本実施形態では、ルンゲクッタジル法を用いてFugacityを求めたが、他の方法を用いて微分方程式を解くこともできる。しかしながら、ルンゲクッタジル法を用いると、上述した微分方程式のプログラムをBasicで容易に組むことができるので望ましい。また、ルンゲクッタジル法以外で微分方程式を解く際にも、前述のように、予測刻み時間幅を設定することにより、同様の効果を得ることが可能である。

(6) 第6の実施形態

本発明の第6の実施形態について図面に基づいて説明すれば、以下の通りである。本実施形態に係る有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法は、第5の実施形態において、床が繊維の穂立ちを有する敷物で構成されている場合の、化合物の振る舞いを予測するものである。なお、説明の便宜上、上記の実施の形態の図面に示した部材と同一の部材には同一の符号を付記し、その説明を省略する。ここでは、床の種類をカーペットとした場合について説明し、第5の実施形態と異なる部分のみの説明を行う。

まず、カーペットを図13A、図13B及び図13Cに示すようにモデル化する。つまり、カーペットを、基材の上に植設された複数のカーペット繊維（繊維の穂立ち）とそれらの繊維間に存在する空間部分とに分ける。このようなカーペットが床全面に敷かれた部屋で薬剤を加熱揮散させると、凝縮粒子がカーペット上に落下し、上記カーペット繊維には薬剤がしみ込むと共に、空間部分には薬剤が溜まることになる。

本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーション方法も、図1のフローチャートにしたがうが、S1では、1次条件として、第5の実施形態の1次条件（表25～表28参照）に、表31に示すカーペット関連1次条件が追加される。尚、カーペットの空間部分の断面積（ A_c ）は、空間部分が室内空気と接触する面積のことである（図13A、図13B及び図13C参照）。

表31

カーペット関連1次条件	記号	数値例
カーペット		
カーペットの空間部分の断面積	A_c	$1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床]}$
カーペット繊維が空間部分の化合物と接触する面積	A_{c5}	$0.192 \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床]}$
カーペット繊維が化合物と接触する面積	A_{a5}	$1.19 \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床]}$
製品の性質		
製品中に含まれる溶剤(Xylene)の含有率	C_{sd}	
製品の希釈倍率	X_{sol}	

尚、表 3 1 における数値例は、図 1 3 A、図 1 3 B 及び図 1 3 C に示す数値に基づいたものである。ここでは、1 つの空間部分を $0.1 \text{ [mm]} \times 0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]}$ 、1 角のカーペット繊維を $2.5 \text{ [mm]} \times 2.5 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]}$ の大きさとしている。また、 $1 \text{ [cm}^2\text{]}$ 中に 16 [個] のカーペット繊維があるものとする。

5 この場合には、各パラメータは、

$$\begin{aligned} A_c &= (0.1 \text{ [mm]} \times 0.1 \text{ [mm]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ &= 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{c5} &= (0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]} \times 4 \text{ [面]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ &= 0.192 \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 10 \quad A_5 &= 1 - A_c \\ &= 1 - 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_{a5} &= A_5 + A_{c5} \\ &= 1.19 \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{ 床]} \end{aligned}$$

と求めることができる。ここで、 A_5 は $1 \text{ [m}^2\text{]}$ 中のカーペット繊維が室内空気
15 と接する面積のことである。

S 2 における 2 次条件としては、第 5 の実施形態の 2 次条件に、表 3 2 に示すカーペット関連 2 次条件が追加される。尚、 k_5 及び V_5 は、第 5 の実施形態
(表 3 0 参照) では床中の化合物の移動速度及び床の体積であったが、各々カー
20 ペット繊維内での化合物の移動速度及びカーペットの全繊維の体積に置換することとする。

表32

カーペット関連 2 次条件	記号
一義的要因条件	
空間部分の薬剤の蒸発定数	R_d
空間部分の温度 (T_d) での湿度	H_m
カーペットの全繊維の体積	V_5
製品中の化合物の移動速度	k_c
製品の性質変化定数	a
経時的変化条件	
空間部分の薬剤と空気との間の 化合物の移動係数	D_{c14}
空間部分の薬剤とカーペット繊維との間の 化合物の移動係数	D_{c5}
空間部分の薬剤の体質	V_c
空間部分の薬剤の Fugacity capacity	Z_c

上記表 3 2 に示した一義的要因条件、及び経時的変化条件の算出法を、水性エアゾール使用の場合、即ち粒子構成溶媒が水の場合を例にして以下に説明する。

カーベットの空間部分に入り込んだ薬剤の蒸発定数 (R_d) は、空間部分の断面積 (A_c)、室温 (T)、及び湿度 (H) より、

$$R_d = A_c h (H_m - H) / C_H \quad \dots (78)$$

$$C_H = 0.24 + 0.46H$$

$$h = 3.06 \times 10^{-4} (T - T_d)^{1/3}$$

と表される。ここで、 T_d はカーベットの空間部分の温度 (湿球温度に相当) であり、 H_m は T_d における空間部分の湿度 (湿球温度での飽和湿度に相当) である。尚、 T_d 及び H_m は、室温 (T) 及び湿度 (H) に基づき、前述の「質量基準湿度表」から求めることができる。オイルベースの製品 (エアゾール) の場合、水とオイルの性質を比較し、 R_d に乗じて薬剤の蒸発定数を算出することができるが、オイルの蒸発が遅い場合 $R_d = 0$ としてもよい。

カーベットの全繊維の体積 (V_s) は、拡散係数 (D_c) 及びカーベット繊維が化合物と接触する面積 (A_{a5}) に基づいて、以下のように求められる。

$$V_s = 2\sqrt{D_c t} A_{a5} \quad \dots (79)$$

製品中の化合物の移動速度 (k_c) は、室内空気における化合物の移動速度を示す k_{14} ($= G v_4 / A_{14}$) を用いて、 $k_{14} / 100$ と表される。

カーベットの空間部分の薬剤と低濃度空気との間の化合物の移動係数 (D_{c14}) は、上記製品中の化合物の移動速度 (k_c)、室内空気における化合物の移動速度を示す (k_{14})、床の面積 ($L_4 \times W_4$)、空間部分の断面積 (A_c)、後述の式 (82) で求められる空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c)、及び第 5 の実施形態の式 (59) で求められる低濃度空気の Fugacity capacity (Z_{14}) より、次のように表される。

$$D_{c14} = \frac{1}{1/(k_c A_c L_4 W_4 Z_c) + 1/(k_{14} A_c L_4 W_4 Z_{14})} \quad \dots (80)$$

空間部分の薬剤とカーベット繊維との間の化合物の移動係数 (D_{c5}) は、製品中の化合物の移動速度 (k_c)、拡散係数 (D_c)、床の面積 ($L_4 \times W_4$)、カーベット繊維が空間部分における化合物と接触する面積 (A_{c5})、空間部分

の薬剤のFugacity capacity (Z_c)、及び第5の実施形態の式(60)で求められる床のFugacity capacity (Z_5)より、

$$D_{cs} = \frac{1}{1/(k_c A_{cs} L_4 W_4 Z_c) + 1/(k_5 A_{cs} L_4 W_4 Z_5)} \quad \dots(81)$$

と表される。但し、 $k_5 (= (D_c / t)^{0.5})$ はカーペット繊維内での化合物の移動速度である。

空間部分の薬剤の体積 (V_c) は、床の面積 ($L_4 \times W_4$)、放出割合 (E_T)、凝縮割合 (C_r)、及び式(78)で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d) より求まる。この空間部分の体積 (V_c) は、薬剤中の溶媒が完全に蒸発するまで減少する。

空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow})、及び製品の性質変化定数 (a) より、次のように表される。

$$Z_c = (e^{-a} K_{ow} + 1 - e^{-a}) C^s / P^s \quad \dots(82)$$

ここで、製品の性質変化定数 (a) は、式(78)で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d)、製品中に含まれる溶剤 (xylene) の含有率 (C_{sd})、及び製品の希釈倍率 ($X_{s.o.1}$) に基づき算出することができる。即ち、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c) は、

$$Z_c = \{ (\text{製品中の有機溶剤の比率}) K_{ow} + (\text{製品中の水の比率}) \} \times C^s / P^s$$

とも表され、この式と上記式(82)とを連立することにより、製品の性質変化定数 (a) が算出される。尚、オイルベースの製品 (エアゾール) の場合、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow}) により、第5の実施形態の式(57)で与えられる。

これにより、カーペットの空間部分の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_c) に関する微分方程式として、次のように表される。

$$\begin{aligned}
 \frac{df_c}{dt} V_c Z_c &= \gamma_c \sum_{i=9}^{11} n_i A_{as} V_i Z_i f_i && \text{Deposition}(i) \quad \dots(83) \\
 &+ R_d L_4 W_4 Z_c f_c && V - \text{change} \\
 F - \text{change} &+ D_{ej} (f_c - f_j) && \text{Transference}(j) \\
 &+ D_{e13} (f_c - f_{13}) && \text{Transference}(k) \\
 &- K_c V_c Z_c f_c && \text{Degradation}
 \end{aligned}$$

また、第5の実施形態における式(71)及び式(70)を、以下の式(84)及び式(85)にそれぞれ置換する。

$$\begin{aligned}
 \frac{df_5}{dt} V_5 Z_5 &= \sqrt{D_c / l} A_5 Z_5 f_5 && V - \text{change} \quad \dots(84) \\
 &+ \sum_{i=9}^{11} n_i V_i Z_i f_i && \text{Deposition}(i) \\
 &+ D_{c5} (f_5 - f_c) && \text{Transference}(c) \\
 &+ D_{145} (f_5 - f_{14}) && \text{Transference}(14) \\
 &- K_5 V_5 Z_5 f_5 && \text{Degradation}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{df_{14}}{dt} V_{14} Z_{14} &= G V_{14} Z_{14} f_{14} && \text{Ventilation} \quad \dots(85) \\
 &- \sum_{i=9}^{11} n_i D_{i14} (f_{14} - f_i) && \text{Transference}(i) \\
 &- \sum_{j=5,13,14} D_{14j} (f_{14} - f_j) && \text{Transference}(j) \\
 &- K_{14} V_{14} Z_{14} f_{14} && \text{Degradation} \\
 &- D_{14c} (f_{14} - f_c) && \text{Transference}(c)
 \end{aligned}$$

即ち、式(84)に示すように、床(カーペット繊維)に関する微分方程式は、第5の実施形態の式(71)に、カーペット繊維への凝縮粒子の堆積量を示す $\text{Deposition}(i)$ の項、及びカーペット繊維と空間部分との間の化合物の移動量を示す $\text{Transference}(c)$ の項が加えられている。

また、式(85)に示す低濃度空気に関する微分方程式において、 Ventilation の項は化合物の室内からの排出量を、 $\text{Transference}(i)$ の項は低濃度空気と凝縮粒子との間の化合物の移動量を、 $\text{Transference}(j)$ の項は低濃度空気と中濃度空気及び床との間の化合物の移動量を、 Degradation の項は化合物の光・酸化分解量を、 $\text{Transference}(c)$ の項は低濃度空気と空間部分との間の化

合物の移動量をそれぞれ示している。

従って、S 3でのFugacity計算は、第5の実施形態の式(67)ないし(69)、(72)ないし(75)、及び上記(83)ないし(85)の12種の微分方程式をルンゲクッタ法で解くことによって行われる。その後のS 4ないしS 17の工程は、第5の実施形態と同様である。

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、床の種類が繊維の穂立ちと穂立ち間の空間部分とを有するカーペットの場合には、3種の凝縮粒子と、化合物濃度に応じて3種に分けた空気と、床と、壁と、化合物濃度に応じて3種に分けた天井とにおけるFugacityに関する11種の連立微分方程式に上記カーペット条件に基づく微分方程式を加えて、Fugacityを計算するものである。

これにより、空間部分に薬剤が溜まることから平坦な床の場合とは化合物の振る舞いが異なる場合でも、正確に化合物の挙動を予測することが可能となり、多様なシミュレーションが行える。

(7) 第7の実施形態

本発明の第7の実施形態について図面に基づいて説明すれば、以下の通りである。

本実施形態にかかる殺虫剤等の薬剤(溶液)に含まれる有害生物防除活性化合物(以下、単に化合物と称する)の室内挙動シミュレーション方法は、上記薬剤を床全面に噴霧する場合の化合物の振る舞いを予測するものであり、床全面にポリマー繊維からなるカーペット(敷物)が敷かれている場合に適用されるものである。また、上記薬剤は、ピレスロイド系殺虫性化合物、有機リン系化合物、カーバメート系化合物、及び昆虫成長抑制剤(IGR)等の殺虫剤等を用いることができ、溶媒としては水やオイルのものがあるが、本実施形態では溶媒が水のものについて説明する。また、殺虫の対象となる害虫は主にノミやダニ等である。

まず、カーペットを図13A、図13B及び図13Cに示すようにモデル化する。つまり、カーペットを、基材の上に植設された複数のカーペット繊維(繊維の穂立ち)とそれらの繊維間に存在する空間部分とに分ける。このようなカー

ベットの敷かれた床全域に薬剤を噴霧すると、薬剤の溶媒が水であるので、上記カーペット繊維には薬剤がしみ込むと共に、空間部分には薬剤が溜まることになる。また、床に付着する以外に、浮遊粒子として空気中に浮遊するものもある。

5 従って、カーベットが敷かれた室内環境を、図17に示すように、カーベットの空間部分、直径が異なる大・小の2種の浮遊粒子、室内空気全体、床（カーベット繊維）、壁、及び天井の7種の媒体に分類する。

10 浮遊粒子を2種に分けるのは、粒子の振る舞いが主にその直径に依存しているためであり、噴霧直後は各粒子は同一箇所分布するが、時間が経てば、大粒子はその重さのため床に近い粒子領域 DZ_2 、そして小粒子は大粒子に比べて軽い
ため天井に近い粒子領域 DZ_3 にそれぞれ分布することになるからである。

上記7種の媒体における化合物のFugacityに関する連立微分方程式を立て、これをルンゲクッタ法を用いて解くことによって、薬剤をカーベット全面に噴霧した際の薬剤中の化合物の室内挙動、即ち室内における化合物分布、床・壁・天井等の内装材への付着量の経時的変化を予測解析する。

15 図1に基づいて、上記化合物の室内挙動予測方法を説明する。本実施形態にかかるシミュレーション方法は、大きくは、室内環境を所定の媒体に分割し、各媒体における化合物の逸散度に関する微分方程式を立てる工程（S1～S2）と、上記微分方程式から、各媒体における化合物の逸散度を求める工程（S3）と、各媒体における化合物の逸散度から、化合物の室内挙動を求める工程（S4）と、
20 微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、室内における化合物のマスバランスの変動に応じて変化させる工程（S21～S35、図5参照）と、化合物の室内挙動に基づいて、化合物の人体に対する安全性を評価する工程（S5～S17）に分割できる。

25 まず、ステップ（以下、Sと略称する）1で1次条件を入力する。この1次条件は、化合物の物理化学的性質（表33参照）、化合物の室内環境挙動性質（表34参照）、室内環境（表35参照）、カーベット条件（表36参照）、及び製品の性質（表37参照）である。

表33

化合物の物理化学的性質	記号	数値例
分子量	M	350.46 [g/mole]
比重	ρ	1 [g/cm ³]
蒸気圧	PS	6.7×10^{-3} [Pa]
水溶解度	CS	1.1×10^{-3} [mole/m ³]
オクタノール／水配分係数	K _{OW}	$10^{5.1}$

表34

化合物の室内環境挙動性質	記号	数値例
光・酸化半減期 in カーペットの空間部分 浮遊粒子 空気 床・壁・天井	τ_c τ_i (i=2,3) τ_4 τ_j (j=5,6,7)	1.89×10^5 [sec]
床・壁・天井中の拡散係数	D _c	4.52×10^{-15} [m ² /s]

表35

室内環境	記号	数値例
部屋の大きさ	V_4	23.3 [m ³]
温度	T	298 [K]
相対湿度	ϕ	60 [%RH]
絶対湿度	H	1.19×10^{-2} [kg-H ₂ O/kg/dry air]
換気率	G	0.58 [1/h]
粒子構成溶媒の室内蒸気圧	P_{∞}	1.89×10^3 [Pa]
空気拡散係数	D_{air}	8.64×10^{-2} [m ² /h]

但し、 $V_4 = L_4 \times W_4 \times H_4$ ($= 3.6\text{m} \times 2.7\text{m} \times 2.4\text{m}$)である。

表36

カーペット条件	記号	数値例
カーペットの空間部分の断面積	A_c	1.6×10^{-3} [m ² /m ² 床]
カーペット繊維が空間部分の化合物と接触する面積	A_{c5}	0.192 [m ² /m ² 床]
カーペット繊維が化合物と接触する面積	A_{a5}	1.19 [m ² /m ² 床]

表37

製品の性質		記号	数値例
化合物含有量		Ca	0.5 [%]
噴霧割合		—	25.4 [ml/m ²]
薬剤床付着率		—	60 [%]
製品中に含まれる溶剤 (Xylene) の含有率		Csd	—
製品の希釈倍率		Xsol	—
浮遊粒子の直径	大粒子	d ₀₂	10 [μ m]
	小粒子	d ₀₃	1 [μ m]
浮遊粒子の分布	大粒子	—	約40 [%]
	小粒子	—	約0.006 [%]
浮遊粒子の空間幅	大粒子	H(2)	2 [m]
	小粒子	H(3)	1 [m]

尚、表 3 5 における数値例は、典型的な日本のアパートの 6 畳間 (9.72 [m²]) を想定したものである。

また、表 3 6 のカーベットの空間部分の断面積 (A_c) は、空間部分が室内空気と接触する面積のことである (図 1 3 A、図 1 3 B 及び図 1 3 C 参照)。さらに、表 3 6 における数値例は、図 1 3 A、図 1 3 B 及び図 1 3 C に示す数値に基づいたものである。ここでは、1 つの空間部分を 0.1 [mm] × 0.1 [mm] × 3 [mm]、1 角のカーベット繊維を 2.5 [mm] × 2.5 [mm] × 3 [mm] の大きさとしている。また、1 [cm²] 中に 16 [個] のカーベット繊維があるものとする。

この場合には、各パラメータは、

$$\begin{aligned} A_c &= (0.1 \text{ [mm]} \times 0.1 \text{ [mm]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ &= 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{床]} \\ A_{c5} &= (0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]} \times 4 \text{ [面]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ &= 0.192 \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{床]} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_5 &= 1 - A_1 \\ &= 1 - 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{床]} \\ A_{a5} &= A_5 + A_{15} \\ &= 1.19 \text{ [m}^2/\text{m}^2 \text{床]} \end{aligned}$$

と求めることができる。ここで、 A_5 は 1 [m²] 中のカーベット繊維が室内空気と接する面積のことである。

次に、上記 1 次条件を用いて 2 次条件を計算で求める (S 2)。この 2 次条件には、1 次条件のみで求まり、時間的に変化しない一義的要因条件 (表 3 8 参照) と、時間的な変化を伴う経時的変化条件 (表 3 9 参照) とがある。これらの計算は後で詳細に説明する。

表38

一義的要因条件	記号
浮遊粒子の蒸発定数 製品中の化合物の体積割合 空気中の化合物の拡散係数 空間部分の薬剤の蒸発定数	α R_a D_{ca} R_d
Fugacity capacity of 浮遊粒子、 空気 床・壁・天井	Z_i ($i=2,3$) Z_4 Z_j ($j=5,6,7$)
分解定数 of カーペットの空間部分 浮遊粒子 空気 床・壁・天井	K_c K_i ($i=2,3$) K_4 K_j ($j=5,6,7$)

表39

経時的変化条件	記号
浮遊粒子の直径 落下速度 浮遊数	d_i ($i=2,3$) v_i ($i=2,3$) n_i ($i=2,3$)
化合物の移動速度 空間部分の薬剤と空気 空間部分の薬剤とカーペット繊維 浮遊粒子と空気 床・壁・天井と空気	D_{c4} D_{c5} D_{i4} ($i=2,3$) D_{4j} ($j=5,6,7$)
空間部分の薬剤の体積 浮遊粒子の体積 床・壁・天井の体積	D_c D_i ($i=2,3$) D_j ($j=5,6,7$)
空間部分の薬剤のFugacity capacity	Z_c

上記2次条件を用いて7種のFugacityを計算する(S3)。即ち、カーベットの空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、床(カーベット繊維)、壁、及び天井に関する7種の微分方程式を連立し、これをルンゲクッタ法で解き、7種のFugacityを経時的に算出する。ここで、微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅(微小時間単位)は、化合物のマスバランスの変動に合わせて自動的に可変して設定されるようになっている。

S4で、上記算出された小粒子のFugacity(必要に応じて大粒子のFugacityも考慮する)及び室内空気のFugacityを用いて化合物の経時的室内空气中濃度を、カーベット繊維及びカーベットの空間部分のFugacityを用いて化合物の床残留量を各々算出する。

S5で、薬剤を吸入した場合における安全性評価を行うか否かを判断し、吸入における安全性評価を行う場合には、上記経時的室内空气中濃度を用いて、汚染された空気を吸入することによって、どの程度曝露されるかを示す吸入推定曝露量を計算する(S6)。その後、吸入推定曝露量に基づいて吸入安全係数を算出する(S7)。S8で、国毎に定められた基準値と上記吸入安全係数とを比較し、基準値に対して吸入安全係数が上回れば「安全性に問題なし」との判断を下す。一方、S8で基準値に対して吸入安全係数が下回れば、「安全性に問題あり」との判断を下し、S1へ戻って例えば、化合物の変更、製剤処方の変更、あるいは使用条件の変更等の1次条件の変更を検討する。

また、上記S5で吸入における安全性評価でない場合には、薬剤が付着した床に接触することによって皮膚がどの程度曝露されるかを示す経皮推定曝露量を計算する(S9)。その後、S10で経皮における安全性評価を行うか否かを判断し、経皮における安全性評価を行う場合には、上記経皮推定曝露量に基づいて経皮安全係数を算出する(S11)。S12で、吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経皮安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S12で安全性に問題がある場合にはS1に戻って1次条件の変更を検討する。

また、上記S10で経皮における安全性評価でない場合には、S13で上記経皮推定曝露量に基づいて、手等に付着した薬剤が口から入ることによってどの程

度曝露されるかを示す経口推定曝露量を計算し（S 1 3）、続いて、この経口推定曝露量に基づいて経口安全係数を算出する（S 1 4）。この経口曝露は、特に幼児が薬剤の付着した手を口に入れることによって起こる可能性がある。S 1 5で吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経口安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S 1 5で安全性に問題がある場合にはS 1に戻って1次条件の変更を検討する。

最後に、S 8、S 1 2、あるいはS 1 5において、安全であると判断された場合には総合的な安全性の評価を行う。ここでは、先に求められた吸入安全係数、経皮安全係数、及び経口安全係数の各々の逆数の和を求めて、得られた値を逆数にすることにより、総合安全係数を求める（S 1 6）。この総合安全係数を基準値と比較することによって、先の安全性評価と同様の評価を行う（S 1 7）。

次に、上記S 2～S 4、S 6、S 7、S 9、S 1 1、S 1 3、及びS 1 4の工程について詳細に説明する。

(i) 2次条件計算（S 2）

上記表 3 8 に示した一義的要因条件、及び表 3 9 に示した経時的変化条件の計算を説明する。

浮遊粒子の蒸発定数（ α ）は、粒子の表面温度（ T_d ）、粒子構成溶媒の性質（蒸気圧 P_d 、分子量 M_d 、比重 ρ_d ）、及び室内環境（空気拡散係数 D_{air} 、蒸気圧 P_∞ 、室温 T_∞ ）より、以下のように定義される。

$$\alpha = \frac{4D_{air}M_d}{R\rho_d} \left(\frac{P_d}{T_d} - \frac{P_\infty}{T_\infty} \right) \quad \dots(86)$$

但し、 R は気体定数であり、 $P_d (=2.26 \times 10^3 \text{ [Pa]})$ 、 $M_d (=18 \text{ [g/mole]})$ 、並びに $\rho_d (=1 \times 10^6 \text{ [g/m}^3\text{]})$ はここでは水の性質による値とする。また、この場合には T_∞ （粒子から遠く離れた箇所の温度）は室温（ T ）とし、 T_d は室内の湿球温度（ $=292.5 \text{ [K]})$ とし、 P_∞ （粒子から遠く離れた箇所の水の蒸気圧）は $1.89 \times 10^3 \text{ [Pa]}$ とする。尚、上記数値は、室温（ T ）が 298 [K] 、相対湿度が 60 [%RH] のときの値である。

尚、 T_d は室温（ T ）及び絶対湿度（ H ）に基づき、化学機械の理論と計算（第2版）（亀井三郎編、産業図書）等に記載される「質量基準湿度表」から求

めることができる。また、 P_d と P_∞ は、以下の式より算出可能である。

$$\log_{10} P_d = 10.23 - 1750 / (T_d - 38)$$

$$\log_{10} P_\infty = 8.23 - 1750 / (T - 38) + \log_{10} \psi$$

ここで、 ψ は室内の相対湿度である。

- 5 カーベットの空間部分に入り込んだ薬剤の蒸発定数 (R_d) は、空間部分の断面積 (A_c)、室温 (T)、及び湿度 (H) より、

$$R_d = A_c h (H_m - H) / C_H \quad \dots(87)$$

$$C_H = 0.24 + 0.46H$$

$$h = 3.06 \times 10^{-4} (T - T_d)^{1/3}$$

と表される。ここで、 H_m は温度 (T_d) での湿度である。カーベットの空間部分に入り込んだ薬剤は、蒸発によってその体積が減少し、最後には化合物を残して消えてしまう。そして、残った化合物がカーベット繊維にしみ込むことになる。

10

大・小の浮遊粒子のFugacity capacity ($Z_i, i=2,3$) は、粒子表面の温度 (T_d)、及び化合物の蒸気圧 (P_L^s) より、

$$Z_i = \frac{6 \times 10^6}{P_L^s R T_d} \quad \dots(88)$$

$$P_L^s = P^s \exp\{6.79(T_M / T_d - 1)\}$$

と表される。ここでは、液体状態の化合物の蒸気圧 (P_L^s) を化合物の融点 (T_M) と T_d を用いて算出しているが、 T_M が得られない場合、 P_L^s は固体状態の化合物の蒸気圧 (P^s) と同じとしてよい。

15

空気のFugacity capacity (Z_4) は、室温 (T) より、次のように表される。

$$Z_4 = \frac{1}{RT} \quad \dots(89)$$

20

床、壁、及び天井のFugacity capacity ($Z_j, j=5,6,7$) は、床・壁・天井を覆うカーベット繊維や壁紙がポリマーで形成されているので、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow})、及び床・壁・天井を覆うカーベット繊維や壁紙のオイル成分の含有率 (ρ_j) より、

$$Z_j = \rho_j K_{ow} C^s / P^s \quad \dots(90)$$

と表される。

カーベットの空間部分、浮遊粒子、空気、及び床・壁・天井の分解定数 (K_c)、($K_i, i=2,3$)、(K_4)、($K_j, j=5,6,7$) は、各々の光・酸化半減期 (τ_c)、(τ_i)、(τ_4)、(τ_j) を用いて、次のように示される。

$$\left. \begin{aligned} K_c &= 0.693/\tau_c \\ K_i &= 0.693/\tau_i \\ K_4 &= 0.693/\tau_4 \\ K_j &= 0.693/\tau_j \end{aligned} \right\} \dots(91)$$

7つの媒体中では主に光分解・酸化反応が起こり、このときの反応速度量は分解定数と体積とFugacity capacityとの積で表される。ここで、式(91)に示すような分解定数の内、空気中の化合物の分解定数 (K_4) は、実測が難しく、この値を決定するのは容易でないことが多い。そこで、実測値が入手できない場合、化合物の構造式を用いて、Atmospheric Oxidation program (Atkinson et al., 1984, Chem. Rev. Vol.84, pp437-470)で算出し求める方法もある。また、粒子中並びに内装材(床・壁・天井)中の分解定数については、実測値が入手できない場合、居住者の安全性を見込みゼロとすることも可能である。

時間 t での浮遊粒子の直径 ($d_i, i=2,3$) は、粒子の体積が蒸発により時間と共に小さくなるので、式(86)より求まる蒸発定数 (α)、及び噴霧直後 ($t=0$) の浮遊粒子の直径 (d_{0i}) を用いて、

$$d_i = \sqrt{d_{0i}^2 - 2\alpha t} \quad \dots(92)$$

$$d_i = \sqrt[3]{R_a d_{0i}} \quad \dots(92')$$

として求められる。

一方、この直径 (d_i) は、浮遊粒子中の粒子構成溶媒がすべて蒸発すると、化合物のみの直径となり、一定となる。即ち、粒子構成溶媒がすべて蒸発した後の粒子の直径 (d_i) は、製品中の化合物の体積割合 (R_a) と噴霧直後の粒子の直径 (d_{0i}) とを用いて、上記の式(92')の通りとなる。

製品中の化合物の体積割合 (R_a) は、化合物含有量 (C_a) 及び化合物の比重 (ρ) より、 C_a/ρ として表される。

図18に示すように、薬剤の噴霧直後には、床からある高さに、幅 (W_4)、長さ (L_4)、及び空間幅 ($H_{(i)}$) の粒子領域 (DZ_i) が形成される。粒子領域 (DZ_i) は浮遊粒子の落下速度 (v_i) にしたがって床に近づき、粒子領域 (DZ_i) の底が床に到達すると、浮遊粒子中の化合物はカーベットの空間部分及びカーベット繊維に移動する。

浮遊粒子の落下速度 ($v_i, i=2,3$) は、粒子の動きが重力と空気抵抗に支配されているので、式(92)より求まる浮遊粒子の直径 (d_i) を用いて、ストークスの法則より、以下の式(93)となる。

$$v_i = \frac{\rho g S_c}{18\eta} d_i^2 = \beta(d_{0i}^2 - 2\alpha t) \quad \dots(93)$$

$$S_c = 1 + \frac{2}{7.6 \times 10^7 d_i} [6.32 + 2.01 \exp(-8.322 \times 10^6 d_i)] \quad \dots(93')$$

$$v_i = (\rho / \rho_a) \beta d_i^2 \quad \dots(93'')$$

但し、 g は重力加速度、 η は空気の粘性率、 S_c はすべり補正係数、及び β は速度係数である。ここで、すべり補正係数 (S_c) は、粒子が小さくなるとストークスの法則に従わなくなるので、これを補正するための係数であり、式(92)より求まる粒子の直径 (d_i) により上記の式(93')で示される。

一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の落下速度 (v_i) は、化合物の比重 (ρ)、粒子構成溶媒の比重 (ρ_a)、速度係数 (β)、及び式(92')より求まる粒子の直径 (d_i) により上記に示す式(93'')と表される。

浮遊粒子の数 ($n_i, i=2,3$) は、窓等からの空気の入れ換えによって減少する。このとき、小粒子は室内空気の流れにしたがって漂い、大粒子もその体積が減少して直径が小さくなるので、室内空気の流れにしたがうものと仮定すると、粒子領域 ($DZ_i, i=2,3$) が床に達するまでの間は、粒子の数 (n_i) は部屋の換気のみで減少することになる。従って、粒子の数 (n_i) は、部屋の大きさ ($V_4 = L_4 \times W_4 \times H_4$)、換気率 (G)、粒子の空間幅 ($H_{(i)}, i=2,3$)、式(93)あるいは(93'')より求まる粒子の落下速度 (v_i) より、以下のように表される。但し、 $k_4 (= G V_4 / A_4)$ は空気中の化合物の移動速度である。

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{n_i}{H_{(i)}}Vi - \frac{n_i}{L_4}k_4 \quad \dots(94)$$

空間部分の薬剤と空気との間の化合物の移動係数 (D_{c4}) は、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、換気率 (G)、空間部分の断面積 (A_c)、後述の式 (101) で求められる空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c)、及び式 (89) で求められる空気の Fugacity capacity (Z_4) より、次のように示される。但し、 $k_c (= k_4 / 100)$ は、空間部分における薬剤の水面上の化合物の移動速度である。

$$D_{c4} = \frac{1}{1/(k_c A_c L_4 W_4 Z_c) + 1/(k_4 A_c L_4 W_4 Z_4)} \quad \dots(95)$$

空間部分の薬剤とカーペット繊維との間の化合物の移動係数 (D_{c5}) は、拡散係数 (D_p)、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、換気率 (G)、空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c)、及び式 (90) より求まる床の Fugacity capacity (Z_5) より、

$$D_{c5} = \frac{1}{1/(k_c A_{c5} L_4 W_4 Z_c) + 1/(k_5 A_{c5} L_4 W_4 Z_5)} \quad \dots(96)$$

と表される。但し、 $k_5 (= (D_p / t)^{0.5})$ はカーペット繊維内での化合物の移動速度であり、 A_{c5} は床に対するカーペット繊維と空間部分の接触面積比である。

床・壁・天井中の化合物の拡散係数 (D_p) は、空気中の化合物の拡散係数 (D_{ca}) に 10^{-9} を乗じて求めることが可能であり、 D_{ca} は化合物の性質 (構造式、分子量等) から例えば、Wike and Lee Method (Handbook of Chemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill Book Company, 1982) に従って、算出可能である。

浮遊粒子と空気との間の化合物の移動係数 (D_{i4}) は、式 (92) あるいは (92') で求まる粒子の直径 (d_i)、空気中の化合物の移動速度 (k_4)、式 (93) または (93'') で求まる落下速度 (v_i)、式 (88)、(89) で求まる Fugacity capacity (Z_i)、及び (Z_4) より、

$$D_{i4} = \frac{1}{1/(k_i A_i Z_i) + 1/\{(k_4 + v_i) A_i Z_4\}} \quad \dots(97)$$

となる。ここで、 $A_i (= \pi d_i^2)$ は浮遊粒子の表面積であり、 $k_i (= k_4 / 100)$ は粒子表面における化合物の移動速度である。

- 5 空気と、床・壁・天井と間の化合物の移動係数 (D_{4j}) は、床・壁・天井中の拡散係数 (D_p)、部屋の大きさ ($L_4 \times W_4 \times H_4$)、換気率 (G)、式 (89)、(90) で求まる Fugacity capacity (Z_4)、及び (Z_j) より、

$$D_{4j} = \frac{1}{1/(k_4 A_j Z_4) + 1/(k_j A_j Z_j)} \quad \dots(98)$$

となる。但し、 A_j は壁及び天井の表面積であり、 $k_j (= (D_p / t)^{0.5})$ は床・壁・天井中の化合物の移動速度である。

- 10 空間部分の薬剤の体積 (V_c) は、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、噴霧割合、製品中に含まれる溶剤 (xylene) の含有率 (C_{sd})、製品の希釈倍率 (X_{sol})、及び式 (87) で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d) より求まる。この空間部分の体積 (V_c) は、薬剤中の粒子構成溶媒が完全に蒸発するまで減少する。

- 15 浮遊粒子はそのほとんどが水分 (粒子構成溶媒) であるため、時間の経過と共に、その体積は小さくなる。そして、粒子構成溶媒が完全に蒸発するまで浮遊粒子の体積は減少するので、浮遊粒子の体積変化 (dV_i / dt) は、式 (92) あるいは (92') より求まる浮遊粒子の直径 (d_i)、及び上記蒸発定数 (α) を用いて、次のように表される。

20
$$\frac{dV_i}{dt} = -\frac{\pi}{2} \alpha d_i \quad \dots(99)$$

床・壁・天井の体積 (V_j) は、薬剤が噴霧される前の床・壁・天井を薄い膜状のものと考え、薬剤がそれらの膜にしみ込むにつれてその厚みが増して体積が増加するものと考え、床・壁・天井中の化合物の拡散係数 (D_p) より、以下のようなになる。

25
$$V_j = 2(D_p t)^{0.5} A_j \quad \dots(100)$$

空間部分の薬剤の Fugacity capacity (Z_c) は、最初は上記床・壁・天井

のFugacity capacityと同様に、 $K_{ow} C^s / P^s$ で表されるが、薬剤が蒸発し始めると、Fugacity capacity (Z_c) は徐々に C^s / P^s (水のFugacity capacity) に近づく。従って、Fugacity capacity (Z_c) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール／水分配係数 (K_{ow})、及び製品

$$Z_c = (e^{-a} K_{ow} + 1 - e^{-a}) C^s / P^s \quad \dots(101)$$

ここで、製品の性質変化定数 (a) は、式 (87) で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d)、製品中に含まれる溶剤 (xylene) の含有率 (C_{sd})、及び製品の希釈倍率 (X_{s01}) に基づき算出することができる。即ち、空間部分の

$$Z_c = \{ (\text{希釈液中の有機溶剤の比率}) K_{ow} + (\text{希釈液中の水の比率}) \} \times C^s / P^s$$

とも表され、この式と上記式 (101) とを連立することにより、製品の性質変化定数 (a) が算出される。

(ii) Fugacity計算 (S3)

カーベットの空間部分の薬剤の振る舞いは、Fugacity (f_c) に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned} \frac{df_c}{dt} V_c Z_c &= \gamma_5 \sum_{i=2}^3 n_i v_i A_c V_i Z_i f_i / H_{(i)} && \text{Deposition(i)} \\ &+ R_d L_4 W_4 Z_c f_c && \text{V-change} \\ &- \sum_{k=4}^5 D_{ck} (f_c - f_k) && \text{Transference(4,5)} \\ &- K_c V_c Z_c f_c && \text{Degradation} \end{aligned} \quad \dots(102)$$

と表される。ここで、Deposition(i)の項は浮遊粒子の空間部分への落下に伴う付着を、v-changeの項は空間部分の薬剤の体積変化 (時間と共に減少) を、Transference(4,5)の項は空間部分と空気及び床 (カーベット繊維) との間の化合物の移動量を、Degradationの項は空間部分での化合物の分解量を各々表している。尚、Fugacity (f_c) は空間部分の薬剤が完全に蒸発するまで有効である。また、 γ_5 は、浮遊粒子が床に付着する割合を示す。

大・小の浮遊粒子中の化合物の振る舞いは、Fugacity ($f_i, i=2,3$)に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned} \frac{df_i}{dt} V Z_i &= \frac{\pi}{2} \alpha d_i Z_i f_i && V - change && \dots(103) \\ &F - change && - D_{i4}(f_i - f_4) && Transference(4) \\ &&& - K_i V Z_i f_i && Degradation \end{aligned}$$

と表される。ここで、v-changeの項は浮遊粒子の体積変化（時間と共に減少）を、Transference(4)の項は粒子と空気との間の化合物の移動量を、Degradationの項は粒子中の化合物の分解量を各々表している。尚、時間の経過と共にカーベットの空間部分や床（カーベット繊維）に粒子が吸収されて、Fugacity (f_i)は失われる。

室内空気中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_4)に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned} \frac{df_4}{dt} V_4 Z_4 &= - G V_4 Z_4 f_4 && Ventilation && \dots(104) \\ &F - change && - D_{c4}(f_4 - f_c) && Transference(c) \\ &&& - \sum_{i=2}^3 n_i D_{i4}(f_4 - f_i) && Transference(i) \\ &&& - \sum_{j=5}^7 D_{4j}(f_4 - f_j) && Transference(j) \\ &&& - K_4 V_4 Z_4 f_4 && Degradation \end{aligned}$$

と表される。ここで、Ventilationの項は化合物の室内からの排出量を、Transference(c)の項は空気と空間部分との間の化合物の移動量を、Transference(i)の項は空気と浮遊粒子との間の化合物の移動量を、Transference(j)の項は空気と床・壁・天井との間の化合物の移動量を、Degradationの項は空気中での化合物の分解量をそれぞれ示している。

床（カーベット繊維）中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_5)に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned}
 \frac{df_5}{dt} V_5 Z_5 &= \gamma_5 \sum_{i=2}^3 n_i v_i A_{as} V_i Z_i f_i / H_{(i)} && \text{Deposition(i)} \quad \dots(105) \\
 &- \sqrt{D_p / t} A_{as} Z_5 f_5 && \text{V-change} \\
 &- D_{cs}(f_5 - f_c) && \text{Transference(c)} \\
 &- D_{4s}(f_5 - f_4) && \text{Transference(4)} \\
 &- K_5 V_5 Z_5 f_5 && \text{Degradation}
 \end{aligned}$$

と表される。ここで、Deposition(i)の項は浮遊粒子のカーペット繊維への落下に伴う付着を、v-changeの項は床の体積変化（時間と共に増加）を、Transference(c)の項はカーペット繊維と空間部分との間の化合物の移動量を、Transference(4)の項はカーペット繊維と空気との間の化合物の移動量を、Degradationの項はカーペット繊維中での化合物の分解量をそれぞれ示している。

壁及び天井中の化合物の振る舞いは、Fugacity ($f_j, j=6,7$) に関する微分方程式として、

$$\begin{aligned}
 \frac{df_j}{dt} V_j Z_j &= - \sqrt{D_p / t} A_j Z_j f_j && \text{V-change} \quad \dots(106) \\
 &+ r_j \sum_{i=2}^3 n_i v_i V_i Z_i f_i / H_{(i)} && \text{Deposition} \\
 &- D_{4j}(f_j - f_4) && \text{Transference} \\
 &- K_j V_j Z_j f_j && \text{Degradation}
 \end{aligned}$$

と表される。ここで、v-changeの項は壁・天井の体積変化（時間と共に増加）を、Transference(4)の項は壁・天井と空気との間の化合物の移動量を、Degradationの項は壁・天井中の化合物の分解量を各々示している。また、 γ_j は、壁、天井に浮遊粒子が付着する割合である。

上記式（102）ないし（106）の7種の微分方程式を連立してルンゲクッ

タジル法にて解くことにより、Fugacity ($f_2 \sim f_7$ 、及び f_0) を算出する。

この連立微分方程式を解くときに、微小時間単位である予測刻み時間幅 (dt) を設定する必要がある。つまり、予測刻み時間幅は、まず時間 (t_0) での連立微分方程式の解を求め、次に予測刻み時間幅を加えた ($t_0 + dt$) 時間での微分方程式の解を求めることであり、予測刻み時間幅を次々と加えながら解を得ることによって経時的に変化するFugacityが求められる。理論的には、上記予測刻み時間幅の設定時間が小さければ小さいほど正確な解を得ることができるが、計算時間が非常に長くなる。逆に、設定時間が大き過ぎると解が発散して、解に誤りが生じ易くなる。

そこで、本願発明では、非常に大きな変化が薬剤に起こるときには予測刻み時間幅が小さく設定されるように、逆に大きな変化がない場合には予測刻み時間幅が大きく設定されるようにしている。

具体的には、薬剤の投入量と得られた解とが合致するように常にマスバランスを確認し、マスバランスが大きく変動しない場合には予測刻み時間幅を大きく、マスバランスが変動し始める場合には予測刻み時間幅を小さくする。例えば、マスバランスの変動を±5%の精度に設定すると、

$$\text{化合物投入量} / (\text{存在量} + \text{分解量} + \text{排出量}) = 0.95 \sim 1.05$$

の関係が常に満たされるように、即ちマスバランスの変動が±5%の範囲内に納まるように予測刻み時間幅を絶えず設定する。

ここで、上記化合物投入量は、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、化合物含有量 (C_a)、及び噴霧割合より求められる。また、存在量は、連立微分方程式で7種の媒体中の経時的な化合物量が求められるので、それらを合計して以下のように算出する。分解量及び排出量も以下に示す通りである。

$$\begin{aligned} \text{存在量} &= V_c Z_c f_c + \sum_{i=2}^3 n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 f_k V_k Z_k \\ \text{分解量} &= K_c V_c Z_c f_c + \sum_{i=2}^3 K_i n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 K_k f_k V_k Z_k \quad \dots(107) \\ \text{排出量} &= G V_4 Z_4 f_4 + \sum_{i=2}^3 G n_i V_i Z_i f_i \end{aligned}$$

図5のフローチャートに基づいて、この予測刻み時間幅 (dt) の設定方法を

説明する。

まず、予測刻み時間幅 (dt) の初期値を入力し (S 2 1)、次にマスバランスの差の上限である上限設定値 (例えば0.1 [%])、及びマスバランスの差の下限である下限設定値 (例えば 10^{-6} [%]) を入力する (S 2 2)。その後、
5 $t = t_0$ のFugacity及びマスバランスを計算し (S 2 3・S 2 4)、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のFugacity及びマスバランスを計算する (S 2 5・S 2 6)。

マスバランスの変動が $\pm 5\%$ の範囲内であるかどうかを確認し (S 2 7)、マスバランスの変動が $\pm 5\%$ の範囲内であれば、 $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のマスバランスとの差が上限設定値以上であるか否かを判断する (S 2 8)。S 2 8で上限設定値以上であれば、
10 予測刻み時間幅 (dt) を小さくした方が解が正確になるので、予測刻み時間幅 (dt) を1/2倍して設定を変更し (S 2 9)、S 2 8で上限設定値より小さければS 3 0で $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + dt$ (あるいは $t_0 + dt$) のマスバランスとの差が下限設定値以下であるか否かを判断する。
15

S 3 0でマスバランスの差が下限設定値以下であれば、予測刻み時間幅 (dt) を大きくしても解には影響を及ぼさないので、予測刻み時間幅 (dt) を2倍して設定を変更し (S 3 1)、次に、S 3 1で変更した予測刻み時間幅 (dt) が予測刻み時間幅 (dt) の最大値 (例えば、0.1 [hour]) 以下であるか否かを判断する (S 3 2)。S 3 2で予測刻み時間幅 (dt) が最大値以下の場合には、解は発散しないので、S 3 1で設定した予測刻み時間幅 (dt) を用いる。一方、S 3 2で予測刻み時間幅 (dt) が最大値より大きい場合には解が発散する可能性があるので、予測刻み時間幅 (dt) を最大値に設定し直す (S 3 3)。また、上記S 3 0において、マスバランスの差が下限設定値よりも大きければ、即ち下限設定値と上限設定値との間にあれば予測刻み時間幅 (dt) は変更せずに計算を続ける。
20
25

上記S 2 9、S 3 0、S 3 2、あるいはS 3 3の工程を経ると、S 2 5へ戻って再び計算を行い、目的の時間に達するまで上記工程を繰り返す。

一方、S 2 7において、マスバランスの変動が±5%の範囲を越えると、マス
バランスの変動が大きいので、変動が±5%の範囲内の場合と比較して予測刻み
時間幅 (d t) を小さくして計算を行った方がよい。従って、一旦計算を中止し
(S 3 4)、下限設定値を小さく設定し直してから (S 3 5)、S 2 3の工程へ
5 戻る。

このように、予測刻み時間幅を一定値にすることなく、マスバランスの変動を
チェックしながら予測刻み時間幅を可変設定することにより、正確に、かつ効率
よくFugacityを算出することが可能となる。

(iii) 経時的室内空气中濃度及び床残留量算出 (S 4)

10 化合物の経時的室内空气中濃度は、上記 (ii) 項目で求められた小粒子のFug
acity (f_3) にFugacity capacity (Z_3) を掛けたものと、室内空氣のFu
gacity (f_4) にFugacity capacity (Z_4) を掛けたものとを足し合わせる
ことによって算出される。尚、薬剤の種類によって大粒子が人体に吸入される場
合には、大粒子のFugacity (f_2) も考慮に入れて計算すればよい。

15 化合物の床残留量は、床のFugacity (f_5) にFugacity capacity (Z_5)
を掛けることによって算出される。特に、溶媒が水である場合、上記算出値
(f_5 , Z_5) と、空間部分のFugacity (f_6) にFugacity capacity (Z_6)
を掛けた値とを合計することによって算出することが望ましい。

(iv) 吸入推定曝露量及び吸入安全係数計算 (S 6・S 7)

20 前述した経時的室内空气中濃度は、例えば図3Aに示すような曲線を描く。こ
の濃度曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積濃度を求め
(図3B参照)、この値から平均室内空气中濃度を算出する。尚、上記特定期間
は目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性
データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

25 次に、上記平均室内空气中濃度、呼吸量、及び曝露時間に基づいて、吸入推定
曝露量を求める。即ち、

吸入推定曝露量 [mg/kg/day] = 平均室内空气中濃度 [mg/m³] ×

呼吸量 [m³/kg/min] × 曝露時間 [min/day]

の計算を行う。ここで、上記呼吸量は文献値あるいは実測値を用いればよい。ま

た、大人と子供とに呼吸量を分けて考慮すれば、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。また、吸入された有害物質が体内に全て吸収されず、呼吸によって一部排出される場合は、吸入比率を考慮することにより、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。

- 5 吸入安全係数は、予め動物実験により調べられた吸入毒性に関する無影響量と、先に求められた吸入推定曝露量とから算出される。即ち、

吸入安全係数＝

$$\text{吸入無影響量 [mg/kg/day]} / \text{吸入推定曝露量 [mg/kg/day]}$$

で表される。

- 10 (v) 経皮推定曝露量及び経皮安全係数計算 (S 9・S 11)

前述の床残留量は、例えば図 4 A に示すような曲線を描く。この残留量曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積残留量を求め (4 B 参照)、この値から平均床残留量を算出する。尚、上記特定期間は、目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間

15 を考慮し、適切な期間を設定する。

次に、平均床残留量、皮膚付着率、接触面積、及び体重に基づいて、経皮推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} = (\text{平均床残留量 [mg/m}^2\text{]} \times \text{皮膚付着率 [\%]} \times \text{接触面積 [m}^2\text{/day]}) / \text{体重 [kg]}$$

- 20 の計算を行う。ここで、上記接触面積は文献値 (例えば、4 [m²/day]) を用いればよい。また、皮膚付着率は化合物の存在する床に皮膚が接触した場合に、化合物が皮膚に付着する割合のことであり、この値は文献値あるいはモデル実験値を用いればよい。

- 25 上記皮膚付着率のモデル実験方法は、次の通りである。幼児が床に接する圧力と同様の圧力で、デニムの布 (8cm×10cm) の上に重し (8cm×8cm×8cm; 4.2 kg) を載せ、幼児が動くような速さ (120cm/15sec) でデニムの布を床上で引っ張る。このデニムと床を分析することにより、デニム及び床に含有される化合物を算出し、その比から皮膚付着率を求める。尚、この方法で得た皮膚付着率は、実際に手を床に押し付けて、手と床の分析値から求めた皮膚付着率と同等か、

あるいは若干高めであることが確認されており、居住者の曝露評価を行う上でこのモデル実験方法は有用であることが確認された。

次に、経皮安全係数は、予め動物実験により調べられた経皮毒性に関する無影響量と、先に求められた経皮推定曝露量とから算出される。即ち、

5 経皮安全係数＝

$$\text{経皮無影響量 [mg/kg/day]} / \text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]}$$

で表される。

しかしながら、一般に経皮無影響量はあまり求められておらず、文献値も多
10 ない。従って、経皮安全係数を、経皮推定曝露量と、文献値が多数存在する経口
無影響量及び経皮吸収率を用いて、以下の式に基づいて求める方がより正確な値
を求めることができる。

$$\text{経皮安全係数} = \text{経口無影響量 [mg/kg/day]} / \\ (\text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} \times \text{経皮吸収率 [\%]})$$

ここで、経皮吸収率が不明の場合には、通常、国別のガイドライン（例えば1
15 0%）があり、これを用いればよい。

(vi) 経口推定曝露量及び経口安全係数計算 (S 1 3・S 1 4)

上記 (v) 項目で得られた経皮推定曝露量、手表面積比、及び口移行率に基づ
いて、経口推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{経口推定曝露量 [mg/kg/day]} = \text{経皮推定曝露量 [mg/kg/day]} \times \\ \text{手表面積比 [\%]} \times \text{口移行率 [\%]}$$

20

の計算を行う。ここで、上記手表面積比は（手表面積／体表面積）で表され、そ
の値は文献値（例えば、5 [%]）を用いればよい。また、口移行率は仮定値で
あり、例えば100%とする。

また、残留噴霧された化合物によって汚染された食器や食品によって経口曝露
25 することが考えられる場合は、上記の手から口への経口推定曝露量に、食器ある
いは食品から口へ経口推定曝露量を加えたものを経口推定曝露量とする必要があ
る。例えば食器からの経口推定曝露量は、食器内に有害物質が残留する量を示す
食器残留量、食器の表面積の総和である食器使用面積、食器からの口移行率に基
づいて、

経口推定曝露量〔mg/kg/day〕＝食器残留量〔mg/m²〕×

食器使用面積〔m²/day〕×口移行率〔%〕／体重〔kg〕

の計算をすることによって得られる。ここで、食器残留量は、（平均床残留量×食器汚染率）で表され、この食器汚染率の値は実測値（例えば9%）又は仮定値を用いばよい。

次に、経口安全係数は、予め動物実験により調べられた経口毒性に関する無影響量と、先に求められた経口推定曝露量とから算出される。即ち、

経口安全係数＝

経口無影響量〔mg/kg/day〕／経口推定曝露量〔mg/kg/day〕

で表される。

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、上記化合物を含む薬剤を床全域に噴霧したときに、カーペット繊維間の空間部分、大・小の2種の浮遊粒子、室内空気、カーペット繊維全体、壁、及び天井のFugacityに関する微分方程式を連立して解き、その解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測するものである。このとき、予測刻み時間幅は、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定される。

従って、連立微分方程式を解くときに、化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように噴霧後の化合物のマスバランスが常にチェックされて予測刻み時間幅が可変するので、マスバランスの変動が小さいときには上記予測刻み時間幅が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると予測刻み時間幅が小さく設定されることとなる。つまり、経時的変化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に予測刻み時間幅が設定される。これにより、コンピュータで処理する際に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

また、本実施形態における有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、上記予測結果を用いて、薬剤を床全面に噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価するものである。

従って、短時間、かつ精度良く、化合物の人体に対する安全性を評価すること

が可能となる。これにより、化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

尚、本実施形態では、ルンゲクッタジル法を用いてFugacityを求めたが、他の方法を用いて微分方程式を解くこともできる。しかしながら、ルンゲクッタジル法を用いると、上述した微分方程式のプログラムをBasicで容易に組むことができるので望ましい。また、ルンゲクッタジル法以外で微分方程式を解く際にも、前述のように、予測刻み時間幅を設定することにより、同様の効果を得ることが可能である。

最後に、本発明の上記各実施形態に用いられるコンピュータプログラム製品（記憶媒体）について説明する。図19は、本発明の上記各実施形態に用いられる記憶媒体20の構成図である。図19に示すように、記憶媒体20は、プログラムを記憶するプログラム領域20aを備えており、このプログラム領域20aには、有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーションプログラム22が記憶されている。有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーションプログラム22は、処理を統括するメインプログラム22aと、所定の媒体に分割された室内環境に応じて、各媒体における化合物の逸散度に関する微分方程式を立てるために必要な1次条件の入力（S1）、及び2次条件の計算（S2）をし、上記の微分方程式を立てる、微分方程式作成プログラム22bと、上記の微分方程式から化合物の逸散度を求める（S3）Fugacity計算プログラム22cと、計算された逸散度から、化合物の室内挙動である、経時的室内空气中濃度及び残留量を算出する（S4）室内挙動計算プログラム22dと、上記の経時的室内空气中濃度及び残留量にもとづいて化合物の人体に対する安全性を評価する（S5～S17）安全性評価プログラム22eと、微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、化合物のマスバランスの変動に応じて変化させる（S21～S35）微小時間単位変更プログラム22fとを備えている。なお、上記かっこ内の記号は、図1又は図5において、対応する工程を示している。

記憶媒体20としては、例えば、フレキシブルディスクやCD-ROMなど、円盤形記憶媒体が用いられる。また、磁気テープなどのテープ型記憶媒体を用い

てもよい。

記憶媒体 20 は、図 20 及び図 21 に示す情報処理装置で用いることができる。つまり、情報処理装置 30 は、媒体ドライブ装置 32 を備えており、この媒体ドライブ装置 32 に記憶媒体 20 を収納することができる。そして、この収納によって、記憶媒体 20 に記憶された情報は、媒体ドライブ装置 32 でアクセス可能となる。このため、プログラム領域 20 a に記憶された、有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーションプログラム 22 が情報処理装置 30 で実行できるようになる。

この情報処理装置の構成は、次の通りである。まず、上述の媒体ドライブ装置 32 と、シミュレーション結果等を示す画像データを記憶する画像メモリ 34 と、オペレーティングシステム (OS) を常駐した作業用メモリ (内部メモリ) 36 と、表示手段であるディスプレイ 38 とを備えている。また、1 次条件等の入力データを受け付けるマウス 40 及びキーボード 42 を有する入力手段である入力装置 44 と、画像データ等を入力するプリンタ 46 と、有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーションプログラム 22 の実行等を制御する CPU 48 とを備えている。

媒体ドライブ装置としては、記憶媒体 20 に対応して、フレキシブルディスクドライブ装置、CD-ROM ドライブ装置、あるいは磁気テープドライブ装置などが用いられる。

次に、記憶媒体 20 のプログラム領域 20 a に記憶された有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーションプログラム 22 の処理について説明する。この処理は、媒体ドライブ装置 32 により読み出された有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーションプログラム 22 を、実行させることによって行われる。この実行によって、まず、有害生物防除活性化合物の室内挙動シミュレーションプログラム 22 のメインプログラム 22 a が起動される。

なお、その後の微分方程式作成プログラム 22 b、Fugacity 計算プログラム 22 c、室内挙動計算プログラム 22 d、安全性評価プログラム 22 e、微小時間単位変更プログラム 22 f の処理はそれぞれ、上記実施形態の説明及び図 1 及び図 5 において説明した通りである。

5 以上のように、本発明の上記各実施形態に用いられるコンピュータプログラム製品（記憶媒体）は、まず環境を、所定の媒体（構成要素）に分割し、これらにおける化合物のFugacityに関する微分方程式を連立して解くことによって、上記化合物を含む薬剤を残留噴霧したときの上記化合物の室内挙動を予測するプログラムを有しているものである。

これにより、環境を複数の媒体と見なし、各媒体間の化合物のやり取り等を考慮しているので、実際の化合物の挙動に近いシミュレーション結果を得ることが可能となる。

10 また、連立微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅は、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、残留噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変して設定される。

15 従って、連立微分方程式を解くときに、化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように残留噴霧後の化合物のマスバランスが常にチェックされて予測刻み時間幅が可変するので、マスバランスの変動が小さいときには上記予測刻み時間幅が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると予測刻み時間幅が小さく設定されることとなる。つまり、経時的变化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に予測刻み時間幅が設定される。これにより、コンピュータで処理する際に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

20 また、本発明の上記各実施形態に用いられるコンピュータプログラム製品（記憶媒体）は、上記予測結果を用いて、薬剤を残留噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価するプログラムを有するものである。

25 従って、短時間、かつ精度良く、化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

産業上の利用の可能性

本発明の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法は、室内

環境を所定の媒体に分割し、各媒体間の化合物のやり取り等を考慮することにより、実際の化合物の挙動に近いシミュレーション結果を得ることが可能になるとともに、経時的变化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マス
5 バランスの変動に合わせて自動的に微小時間単位が設定することができ、コンピュータで上記微分方程式を処理する場合に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

また、本発明の有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法は、
前記化合物の室内挙動に基づいて、前記化合物の人体に対する安全性を評価する
工程をさらに備えているため、短時間、かつ精度良く、有害生物防除活性化合物
10 の人体に対する安全性を評価することが可能となり、上記化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く、目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

請 求 の 範 囲

1. 有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション方法であって、
室内環境を所定の媒体に分割し、該各媒体における前記化合物の逸散度に関する微分方程式を立てる工程と、
5 前記微分方程式から、前記各媒体における前記化合物の逸散度を求める工程と、
前記各媒体における前記化合物の逸散度から、前記化合物の室内挙動を求める工程と、
前記微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、室内における化合物のマス
10 スバランスの変動に応じて変化させる工程と、
を備えるシミュレーション方法。

2. 前記化合物の室内挙動に基づいて、前記化合物の人体に対する安全性を評価する工程、をさらに備えた請求項 1 に記載のシミュレーション方法

3. 前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を残留噴霧することによって室内空間に導入され、

前記媒体は、噴霧箇所、大きさに応じて 1 種以上に分けた浮遊粒子、室内空気、床、壁及び天井である、

請求項 1 または 2 に記載のシミュレーション方法。

4. 前記噴霧箇所における前記微分方程式は、該噴霧箇所における前記化合物の逸散度の時間変化と、該噴霧箇所の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該噴霧箇所への付着量と、該噴霧箇所と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該噴霧箇所における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

5 前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

10 前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

15 前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式である、

請求項 3 に記載のシミュレーション方法。

20 5. 前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を空間噴霧することによって室内空間に導入され、

前記媒体は、大きさに応じて 1 種以上に分けた浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井である、

請求項 1 または 2 に記載のシミュレーション方法。

25 6. 前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸

散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

5 前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

10 前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

15 前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式である、

請求項 5 に記載のシミュレーション方法。

7. 前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を加熱揮散することによって室内空間に導入され、

20 前記媒体は、発生と消滅に応じて 1 種以上に分けた凝縮粒子、高濃度空気、中濃度空気、低濃度空気、床、壁、及び化合物濃度に応じて 1 種以上に分けた天井である、

請求項 1 または 2 に記載のシミュレーション方法。

25 8. 前記凝縮粒子における前記微分方程式は、該凝縮粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該凝縮粒子の体積の時間変化と、該凝縮粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該凝縮粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記高濃度空気における前記微分方程式は、該高濃度空気における前記化合

物の逸散度の時間変化と、前記化合物の放出量と、該高濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該高濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

5 前記中濃度空気における前記微分方程式は、該中濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、該中濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該中濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

10 前記低濃度空気における前記微分方程式は、該低濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該低濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該低濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

15 前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

20 前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式である、

請求項 7 に記載のシミュレーション方法。

25 9. 前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を床全体に噴霧することによって室内空間に導入され、

前記媒体は、大きさに応じて分けた 1 種以上の浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井である、

請求項 1 または 2 に記載のシミュレーション方法。

10. 前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

5 前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

10 前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

15 前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

20 前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式である、
請求項9に記載のシミュレーション方法。

25 11. 前記床は、繊維の穂立ちを有する敷物で構成されており、
前記媒体として、前記穂立ち間の空間をさらに加えた、
請求項3～10のいずれか1項に記載のシミュレーション方法。

12. 前記穂立ち間の空間における前記微分方程式は、該穂立ち間の空間における前記化合物の逸散度の時間変化と、該穂立ち間の空間における前記化合物を含む溶液の体積の時間変化と、前記化合物の該穂立ち間の空間部分への落下によ

る付着量と、該穂立ち間の空間部分と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該穂立ち間の空間部分における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式である、

請求項 1 1 に記載のシミュレーション方法。

5

1 3. 外部からのデータ入力を受け付ける入力手段と、表示手段と、コンピュータ使用可能な記憶媒体から情報を読み出す読み出し手段とを備える情報処理装置とともに用いるためのコンピュータプログラム製品であつて、

10 プログラムを記憶するためのプログラム領域を有しており、かつ、前記入力手段から入力されたデータに基づいて、有害生物防除活性化合物の室内挙動のシミュレーション結果を前記表示手段に表示させるための該記憶媒体中に具現化されたコンピュータ読みとり可能なプログラムを有しているコンピュータ使用可能な記憶媒体を前記コンピュータプログラム製品は備えており、

該コンピュータプログラム製品は、

15

前記プログラム領域において、

室内環境を所定の媒体に分割し、該各媒体における前記化合物の逸散度に関する微分方程式を立てるプログラムと、

前記微分方程式から、前記各媒体における前記化合物の逸散度を求めるプログラムと、

20

前記各媒体における前記化合物の逸散度から、前記化合物の室内挙動を求めるプログラムと、

前記微分方程式を解くときに用いる微小時間単位を、室内における化合物のマスバランスの変動に応じて変化させるプログラムと、

を備えるコンピュータプログラム製品。

25

1 4. 前記コンピュータプログラム製品が、前記プログラム領域において、

前記化合物の室内挙動に基づいて、前記化合物の人体に対する安全性を評価するプログラム、

をさらに備える請求項 1 3 に記載のコンピュータプログラム製品。

15. 前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を残留噴霧することによって室内空間に導入され、

前記媒体は、噴霧箇所、大きさに応じて1種以上に分けた浮遊粒子、室内空気、
5 床、壁及び天井である、

請求項13または14に記載のコンピュータプログラム製品。

16. 前記噴霧箇所における前記微分方程式は、該噴霧箇所における前記化合物の逸散度の時間変化と、該噴霧箇所の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該噴霧箇所への付着量と、該噴霧箇所と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該噴霧箇所における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、
15

前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、
20

前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、
25

前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該

天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式である、

請求項 15 に記載のコンピュータプログラム製品。

5 17. 前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を空間噴霧することによって室内空間に導入され、

前記媒体は、大きさに応じて 1 種以上に分けた浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井である、

請求項 13 または 14 に記載のコンピュータプログラム製品。

10

18. 前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

15

前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

20

前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

25

前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分

解量の変化の関係を記述した微分方程式である、
請求項 1 7 に記載のコンピュータプログラム製品。

19. 前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を加熱揮散することによって室内空間に導入され、

前記媒体は、発生と消滅に応じて 1 種以上に分けた凝縮粒子、高濃度空気、中濃度空気、低濃度空気、床、壁、及び化合物濃度に応じて 1 種以上に分けた天井である、

請求項 1 3 または 1 4 に記載のコンピュータプログラム製品。

20. 前記凝縮粒子における前記微分方程式は、該凝縮粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該凝縮粒子の体積の時間変化と、該凝縮粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該凝縮粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記高濃度空気における前記微分方程式は、該高濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の放出量と、該高濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該高濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記中濃度空気における前記微分方程式は、該中濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、該中濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該中濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記低濃度空気における前記微分方程式は、該低濃度空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該低濃度空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該低濃度空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、該壁と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式である、

請求項 19 に記載のコンピュータプログラム製品。

21. 前記化合物は、前記化合物を含んだ溶液を床全体に噴霧することによって室内空間に導入され、

前記媒体は、大きさに応じて分けた 1 種以上の浮遊粒子、室内空気、床、壁、及び天井である、

請求項 1-3 または 1-4 に記載のコンピュータプログラム製品。

22. 前記浮遊粒子における前記微分方程式は、該浮遊粒子における前記化合物の逸散度の時間変化と、該浮遊粒子の体積の時間変化と、該浮遊粒子と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該浮遊粒子における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記室内空気における前記微分方程式は、該室内空気における前記化合物の逸散度の時間変化と、前記化合物の室内からの排出量と、該室内空気と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該室内空気における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記床における前記微分方程式は、該床における前記化合物の逸散度の時間変化と、該床の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該床への付着量と、該床と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該床における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

前記壁における前記微分方程式は、該壁における前記化合物の逸散度の時間変化と、該壁の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該壁への付着量と、該壁と他の

媒体との間の前記化合物の移動量と、該壁における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式であり、

- 5 前記天井における前記微分方程式は、該天井における前記化合物の逸散度の時間変化と、該天井の体積の時間変化と、前記浮遊粒子の該天井への付着量と、該天井と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該天井における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式である、

請求項 2 1 に記載のコンピュータプログラム製品。

- 10 2 3. 前記床は、繊維の穂立ちを有する敷物で構成されており、前記媒体として、前記穂立ち間の空間をさらに加えた、

請求項 1 5 ～ 2 2 のいずれか 1 項に記載のコンピュータプログラム製品。

- 15 2 4. 前記穂立ち間の空間における前記微分方程式は、該穂立ち間の空間における前記化合物の逸散度の時間変化と、該穂立ち間の空間における前記化合物を含む溶液の体積の時間変化と、前記化合物の該穂立ち間の空間部分への落下による付着量と、該穂立ち間の空間部分と他の媒体との間の前記化合物の移動量と、該穂立ち間の空間部分における前記化合物の分解量の変化の関係を記述した微分方程式である、

請求項 2 3 に記載のコンピュータプログラム製品。

図 1

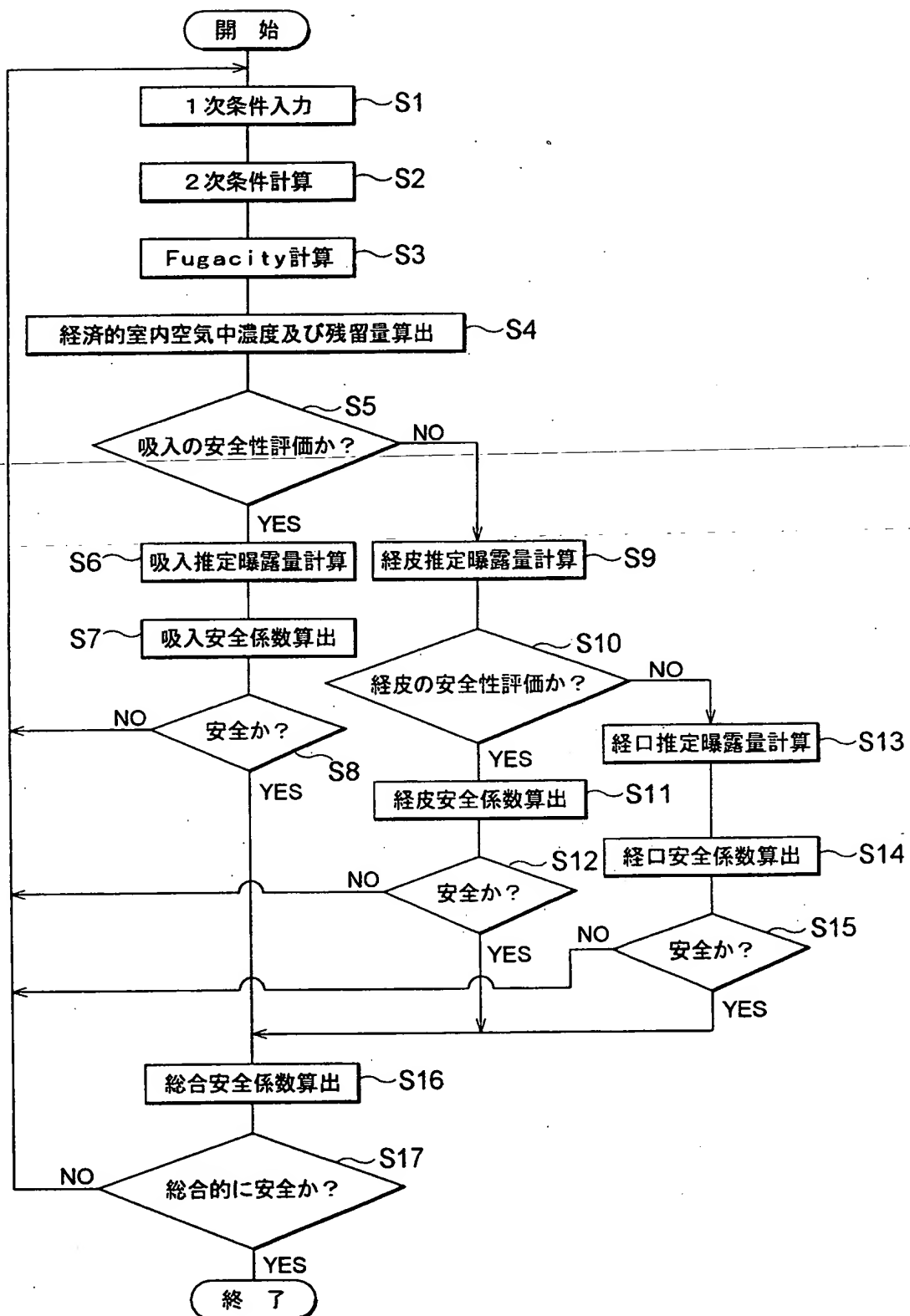


図3B

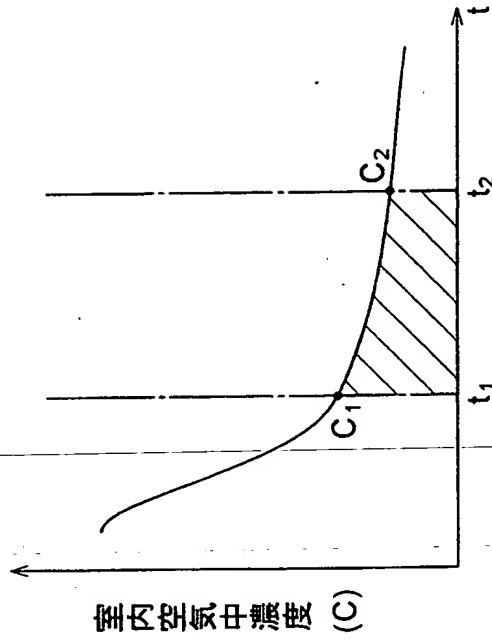


図3A

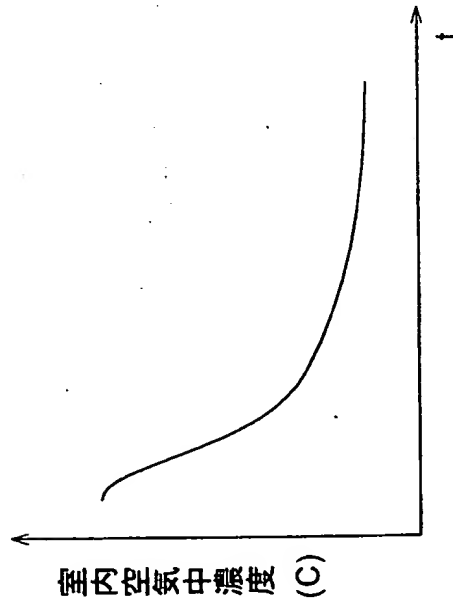


図4B

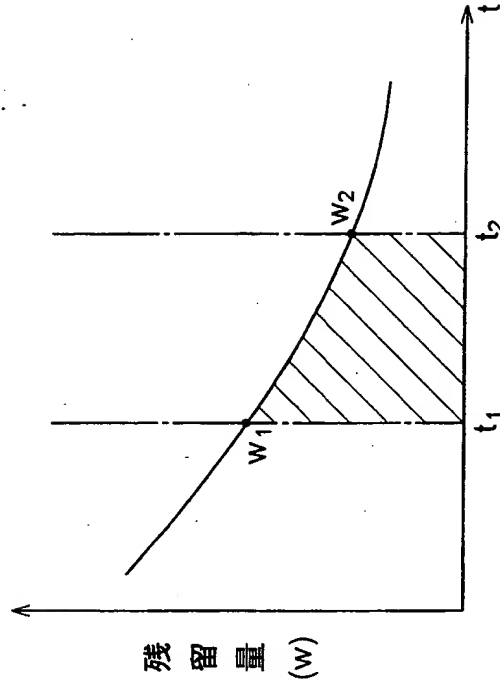


図4A

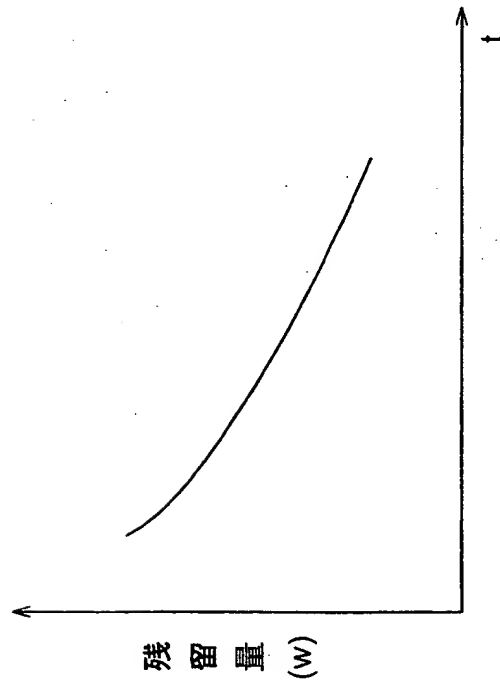


図 5

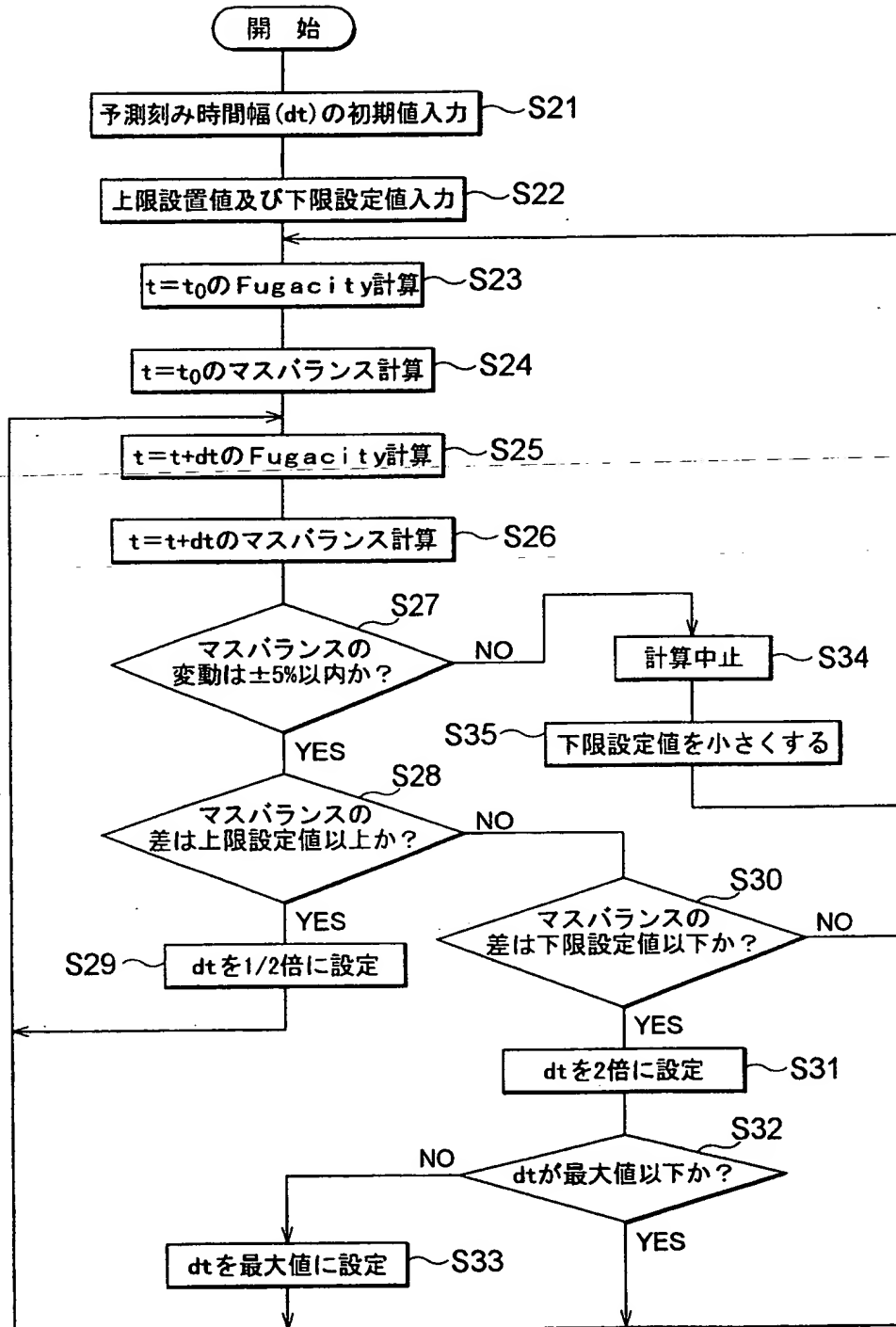


図 6A

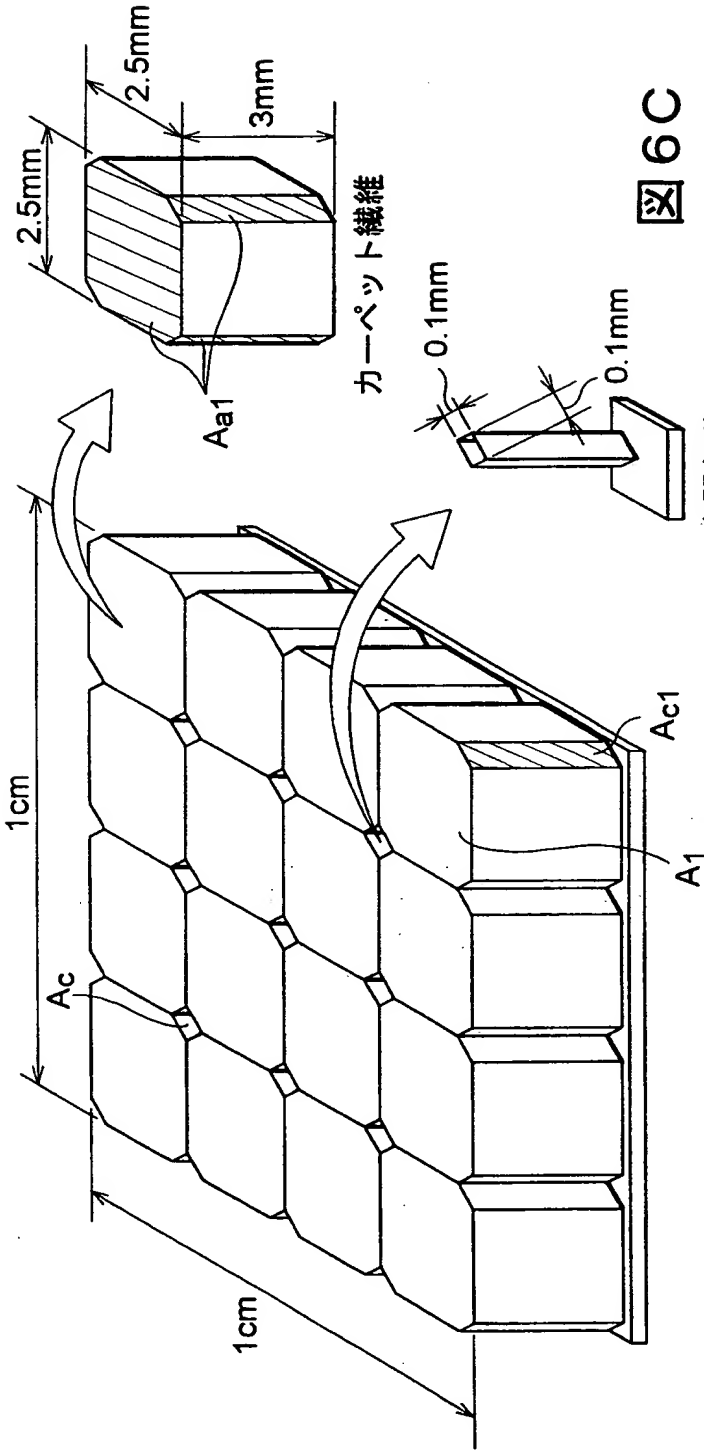


図 6B

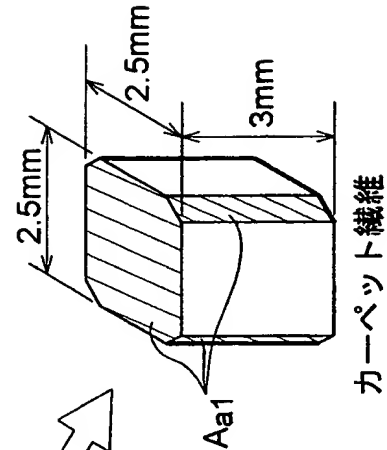


図 6C

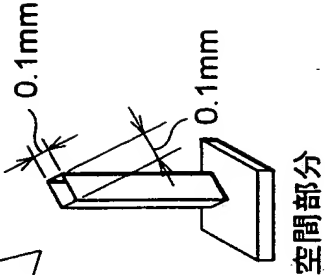


図 7

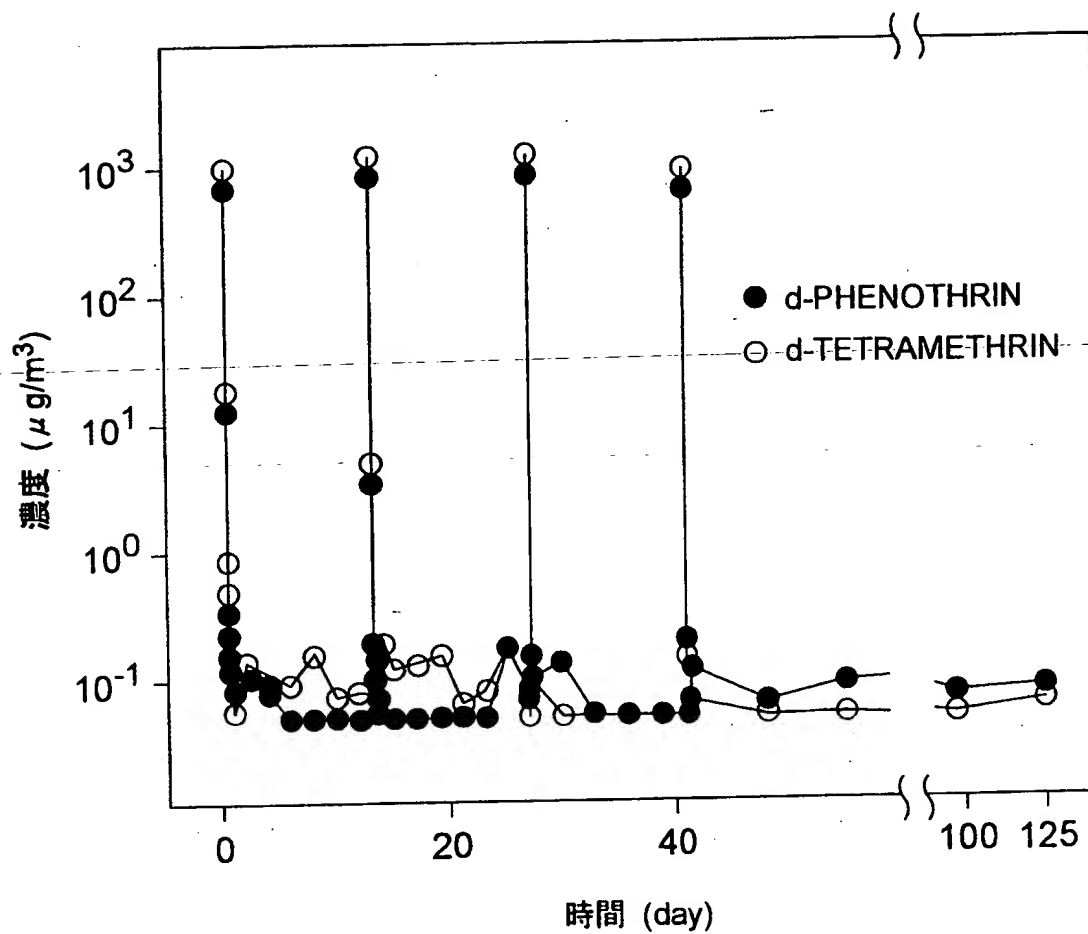


図 8A

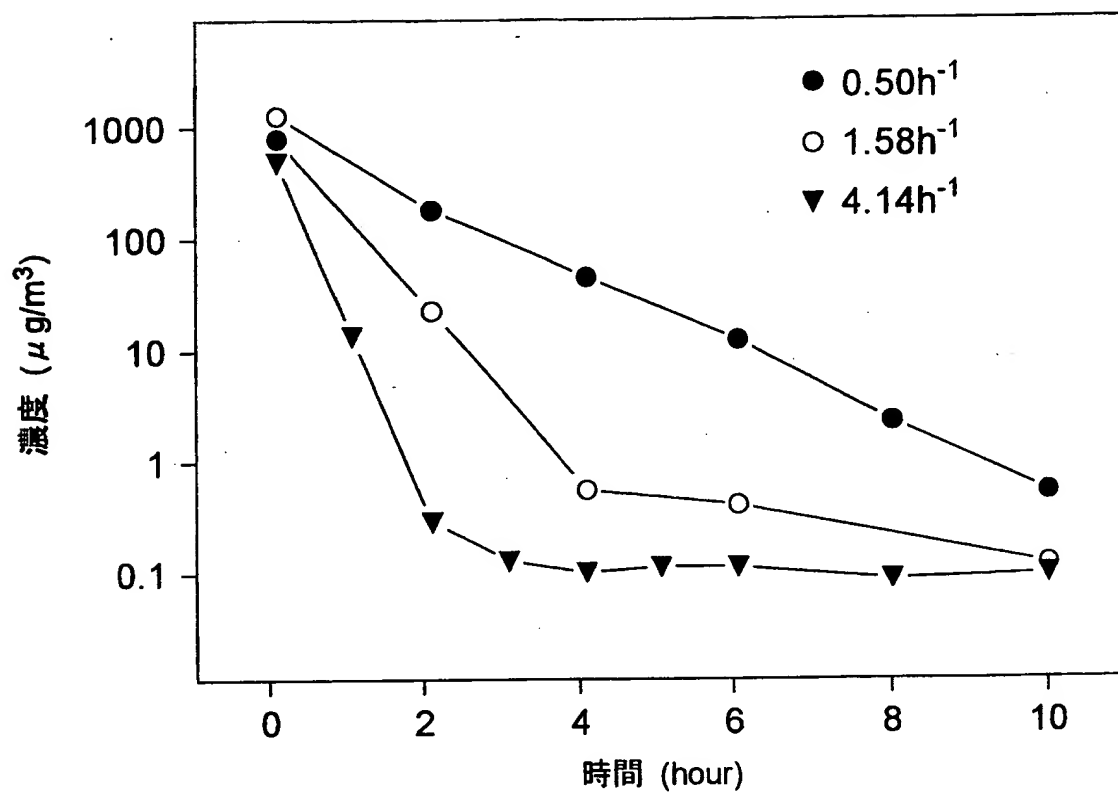
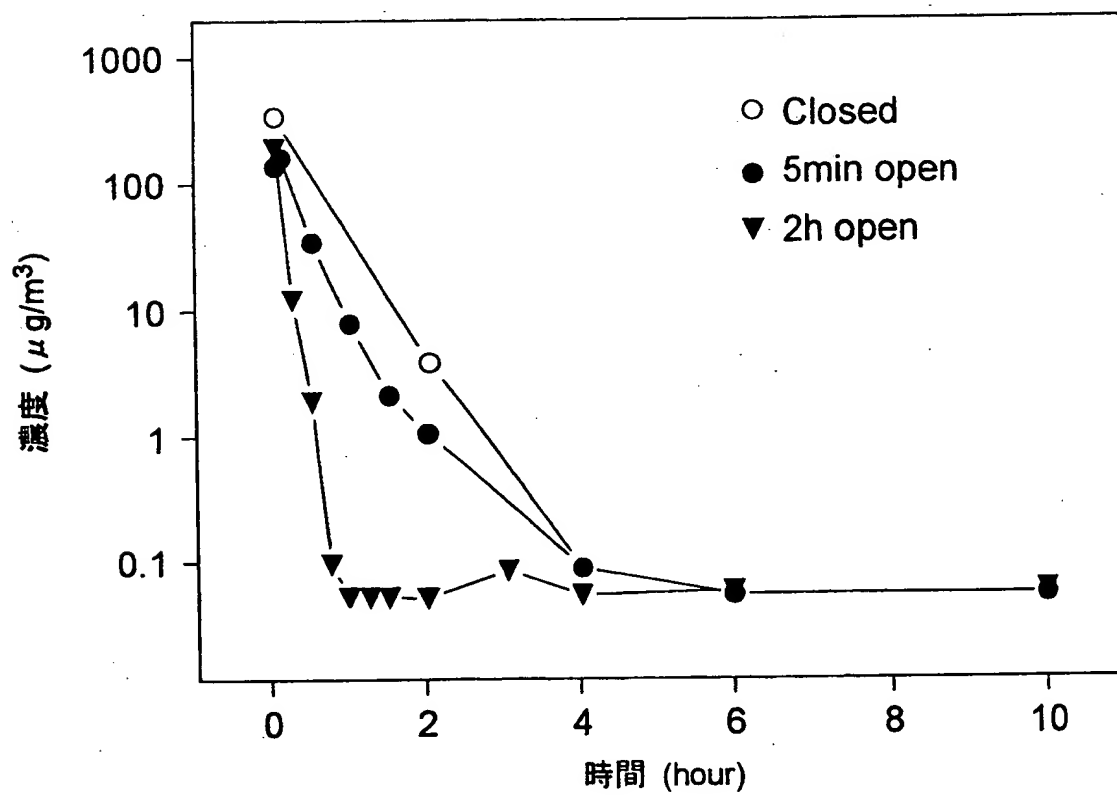


図 8B



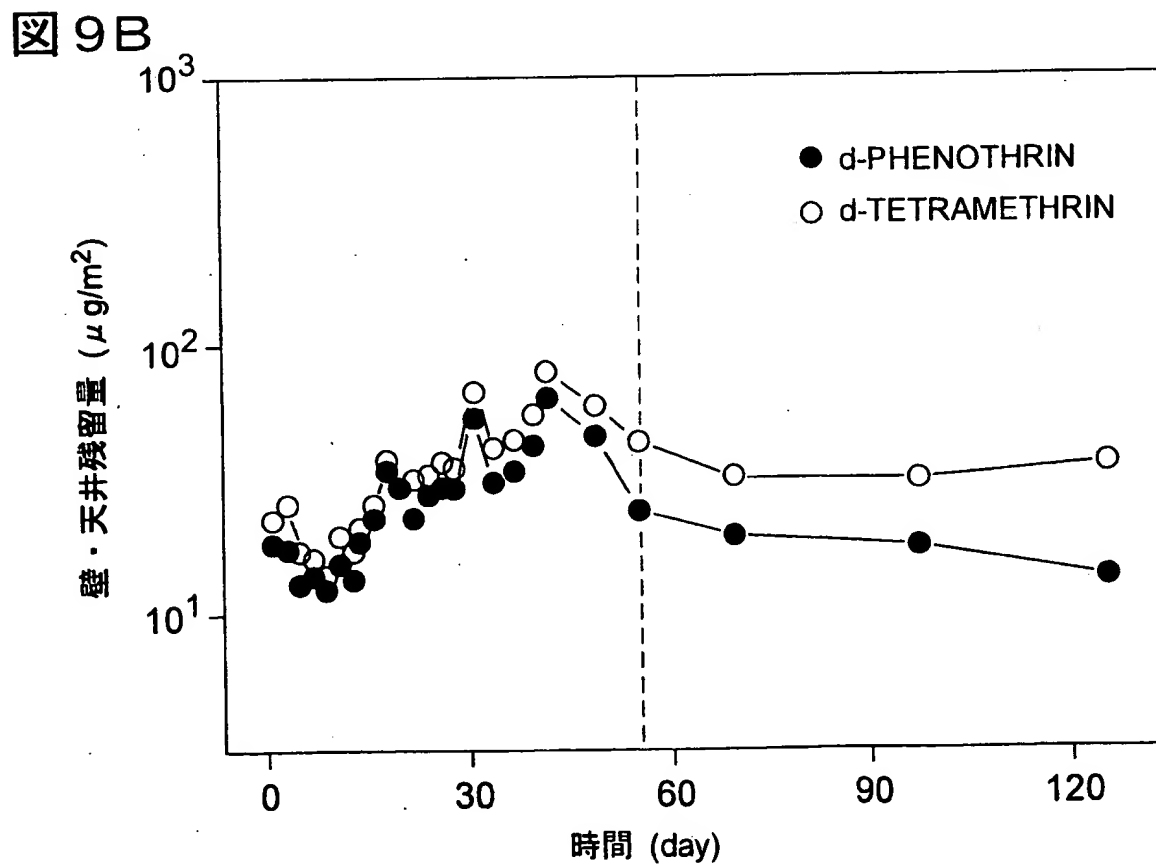
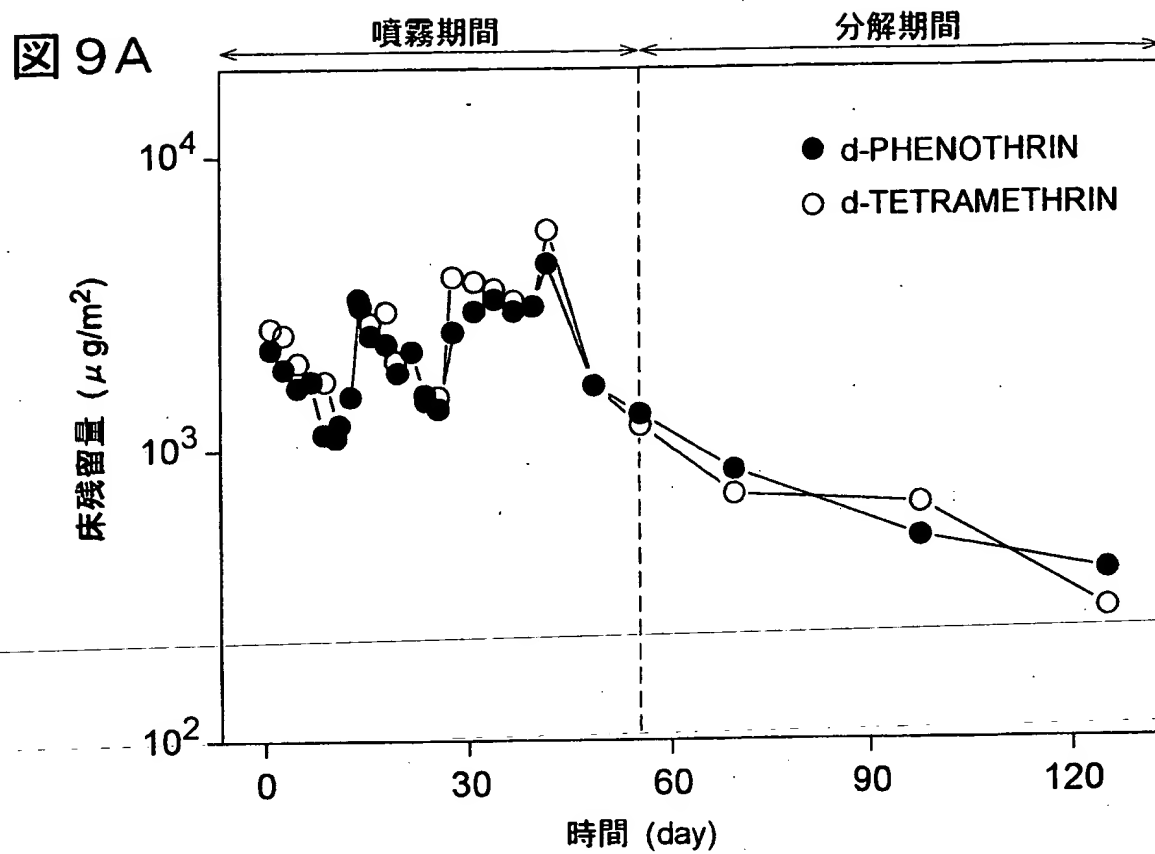


図 10A

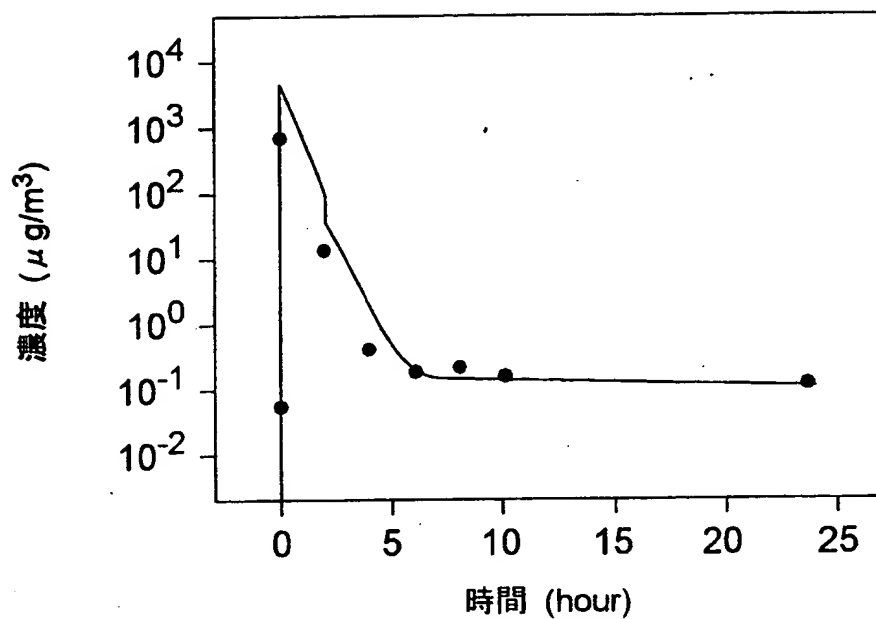
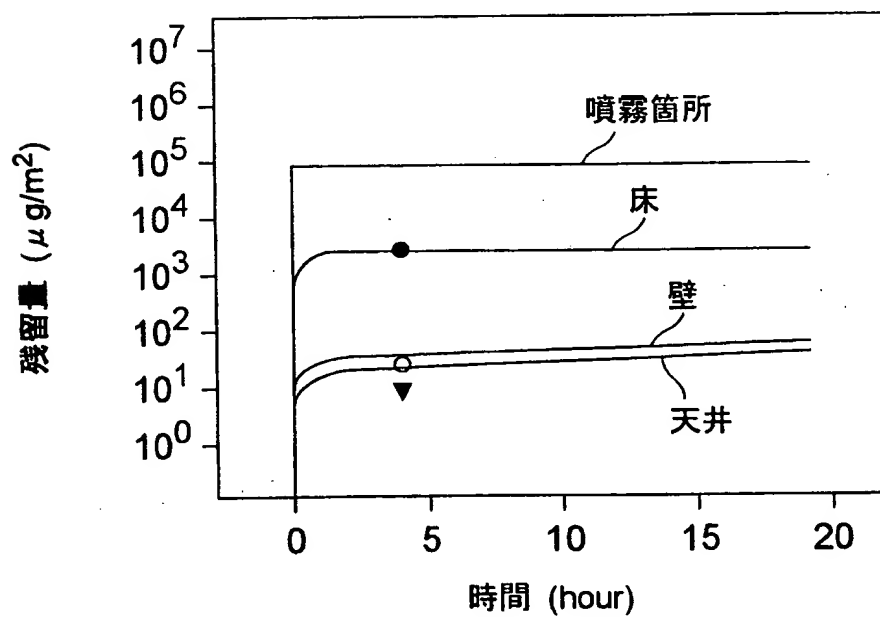


図 10B



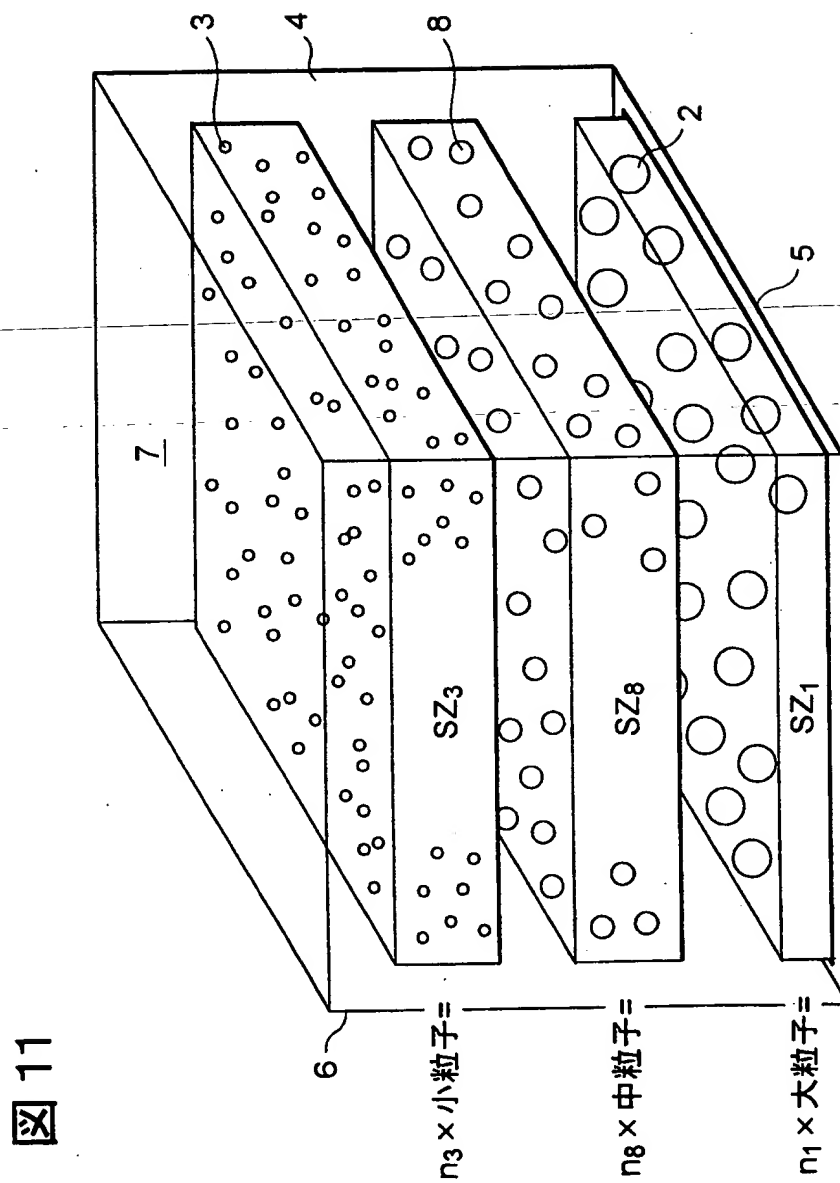


図 12A

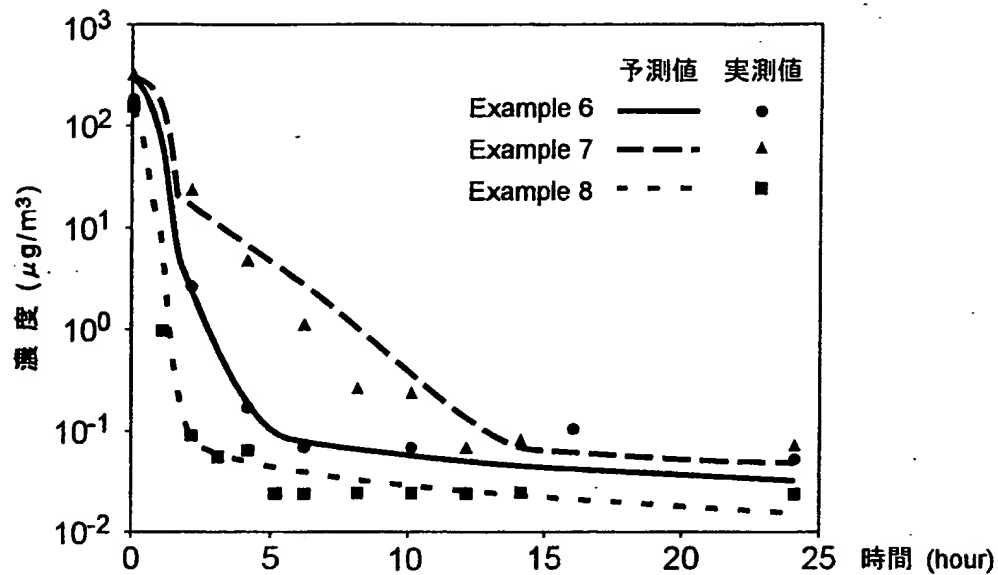


図 12B

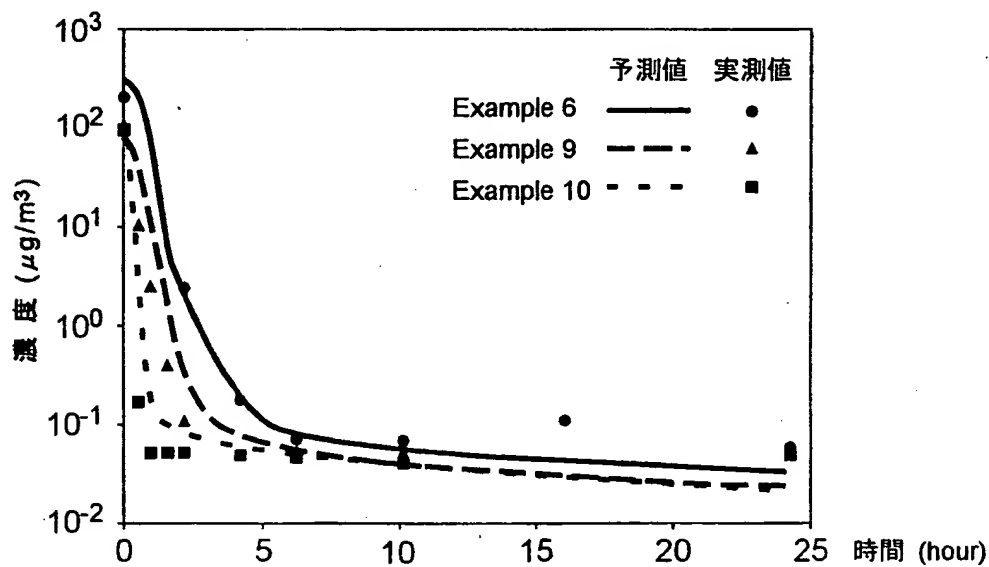


図 12C

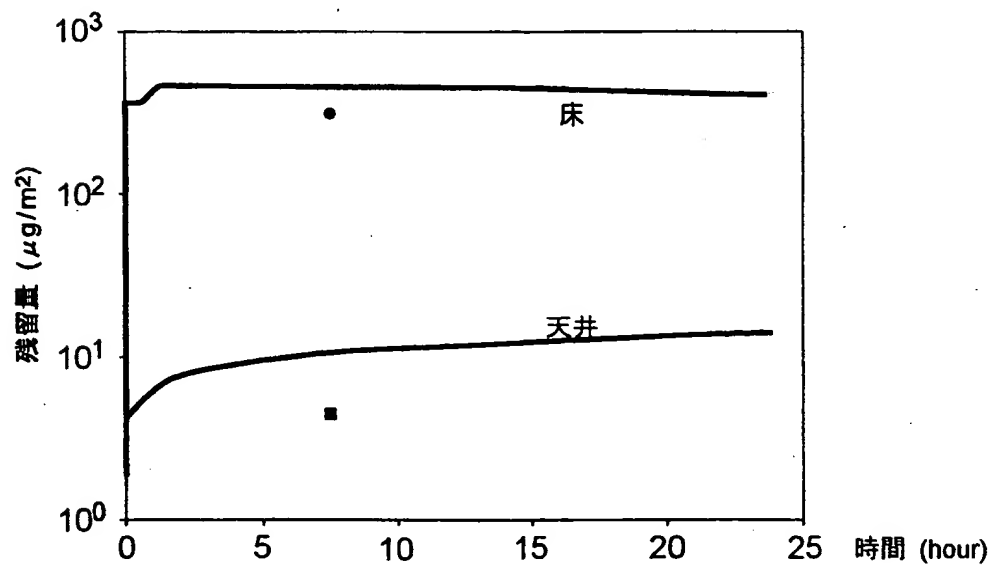


図 14

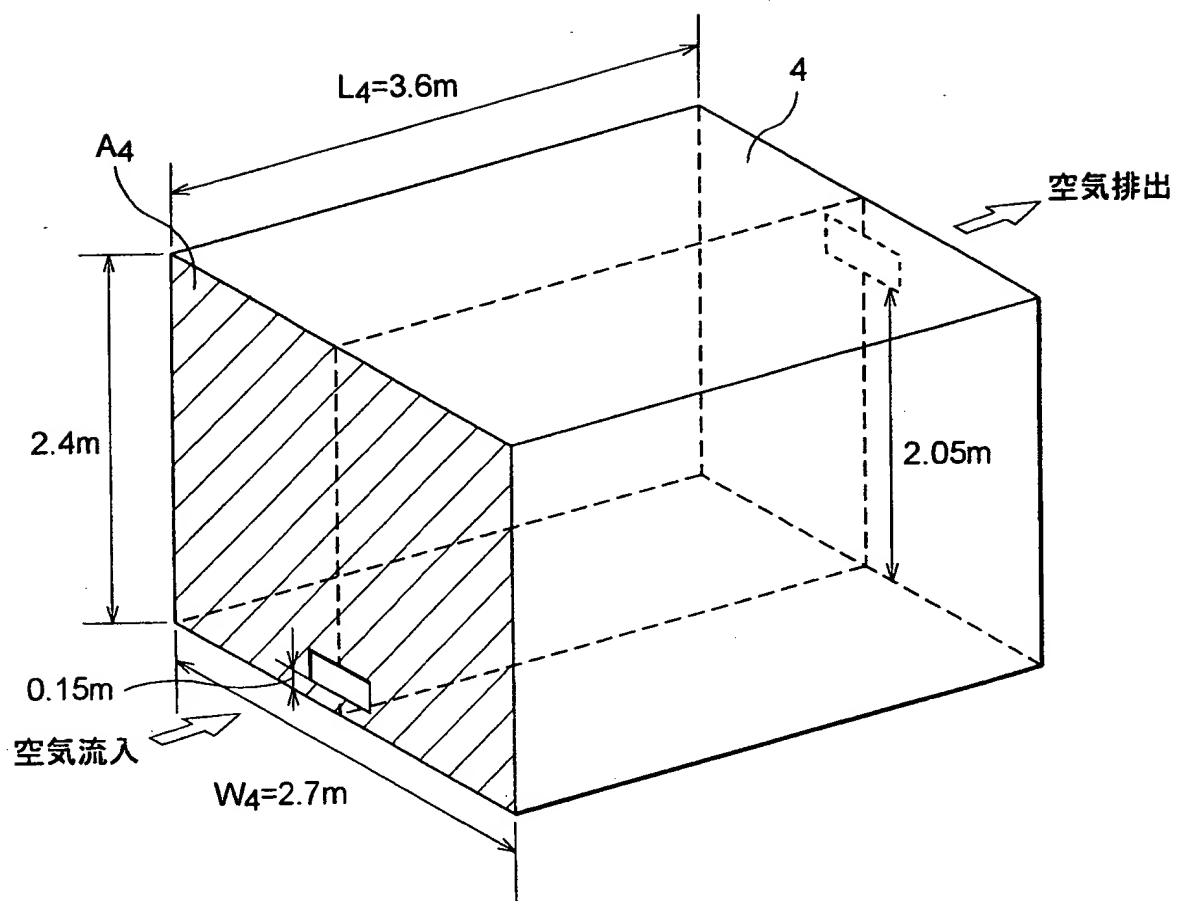


图 15

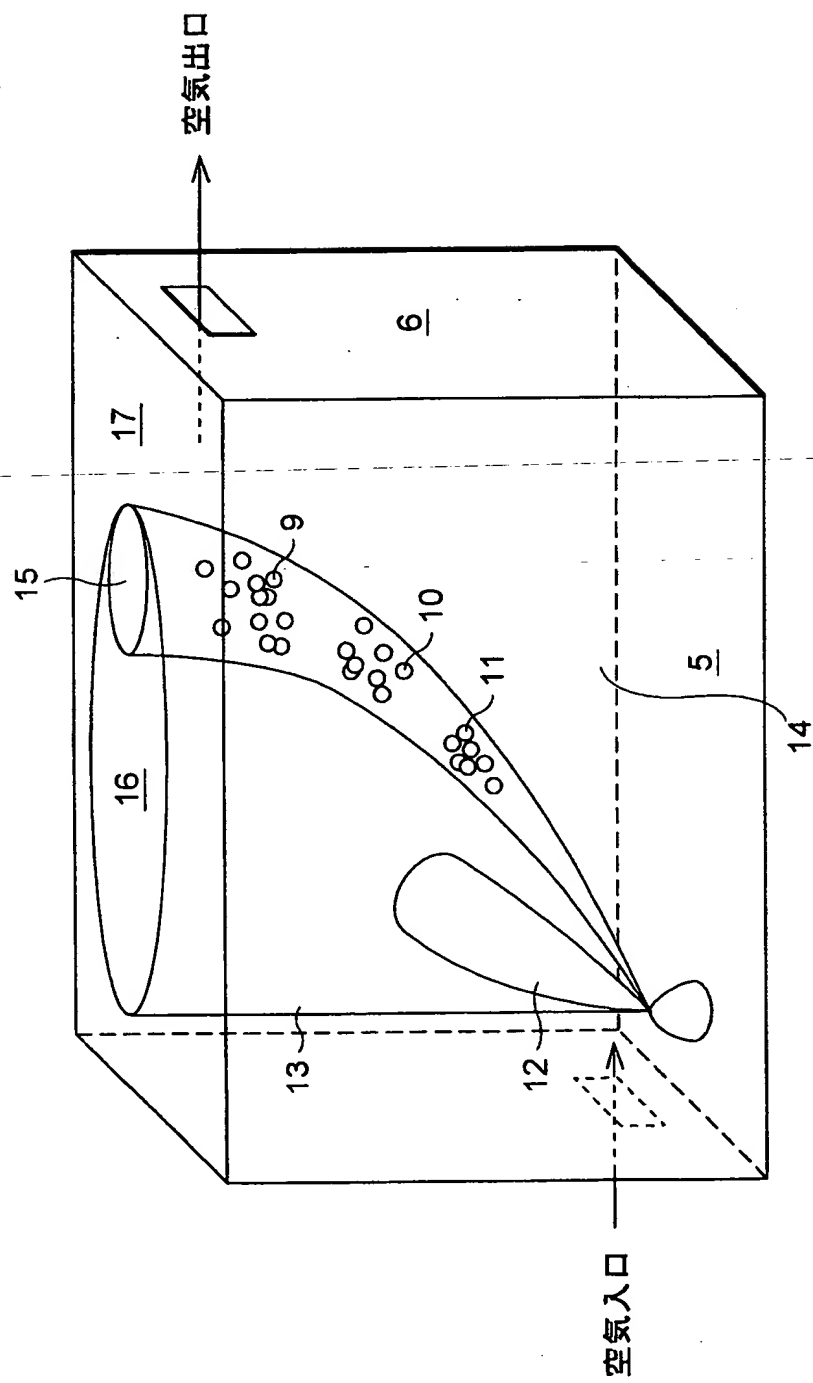


図 16A

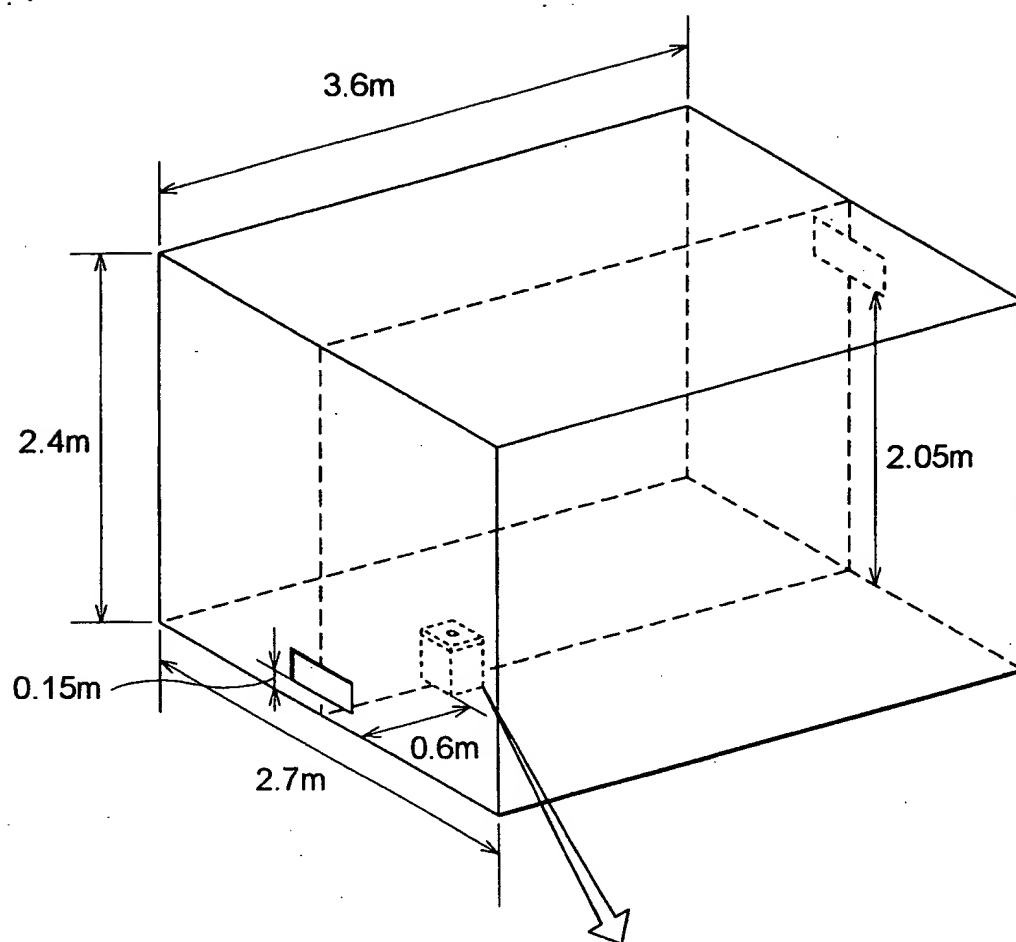


図 16B

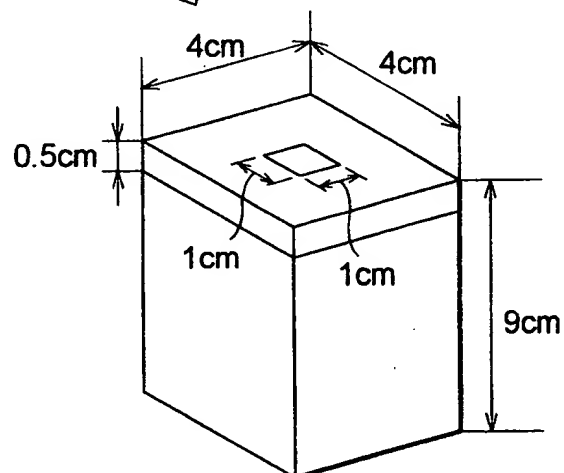
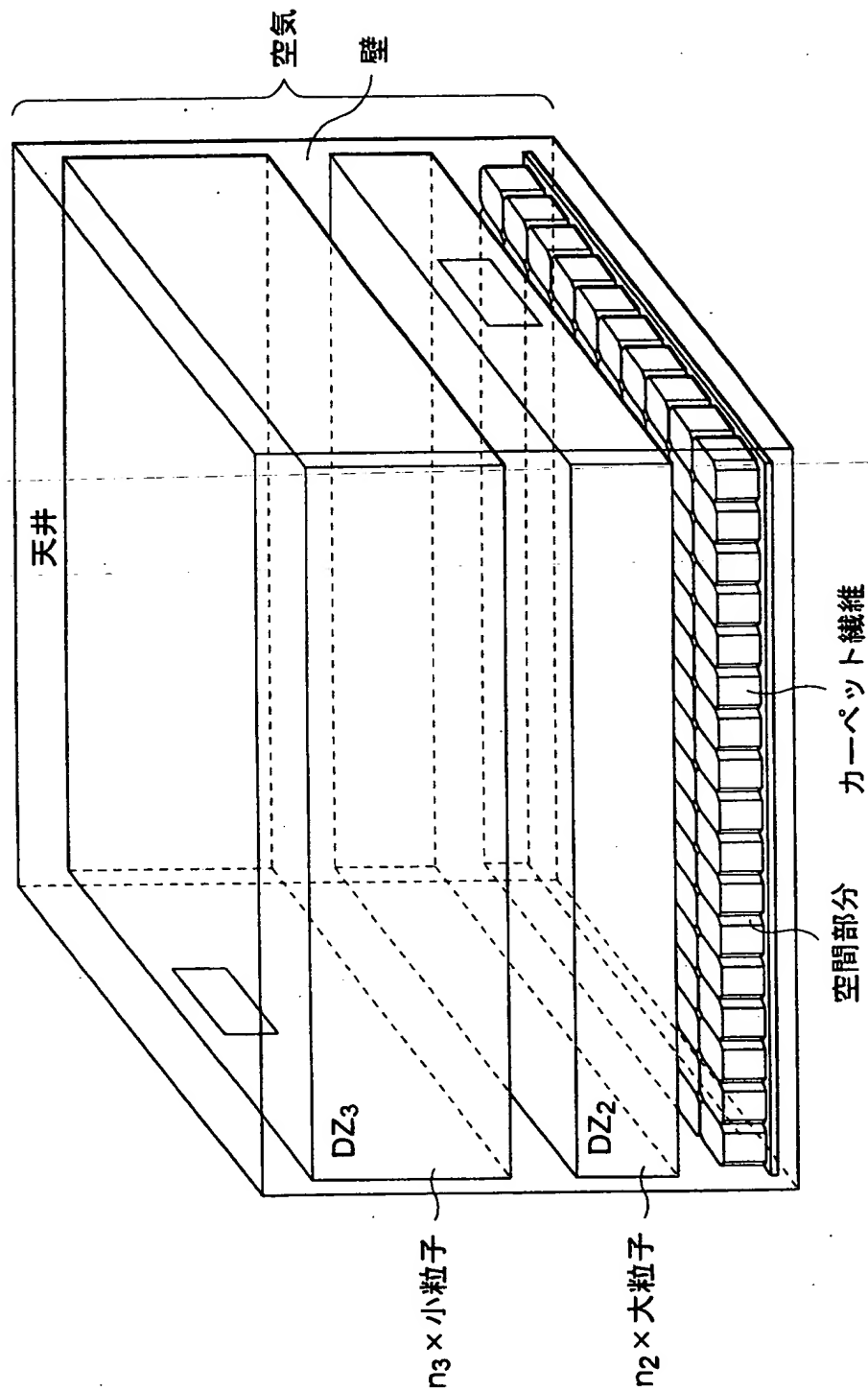


図 17



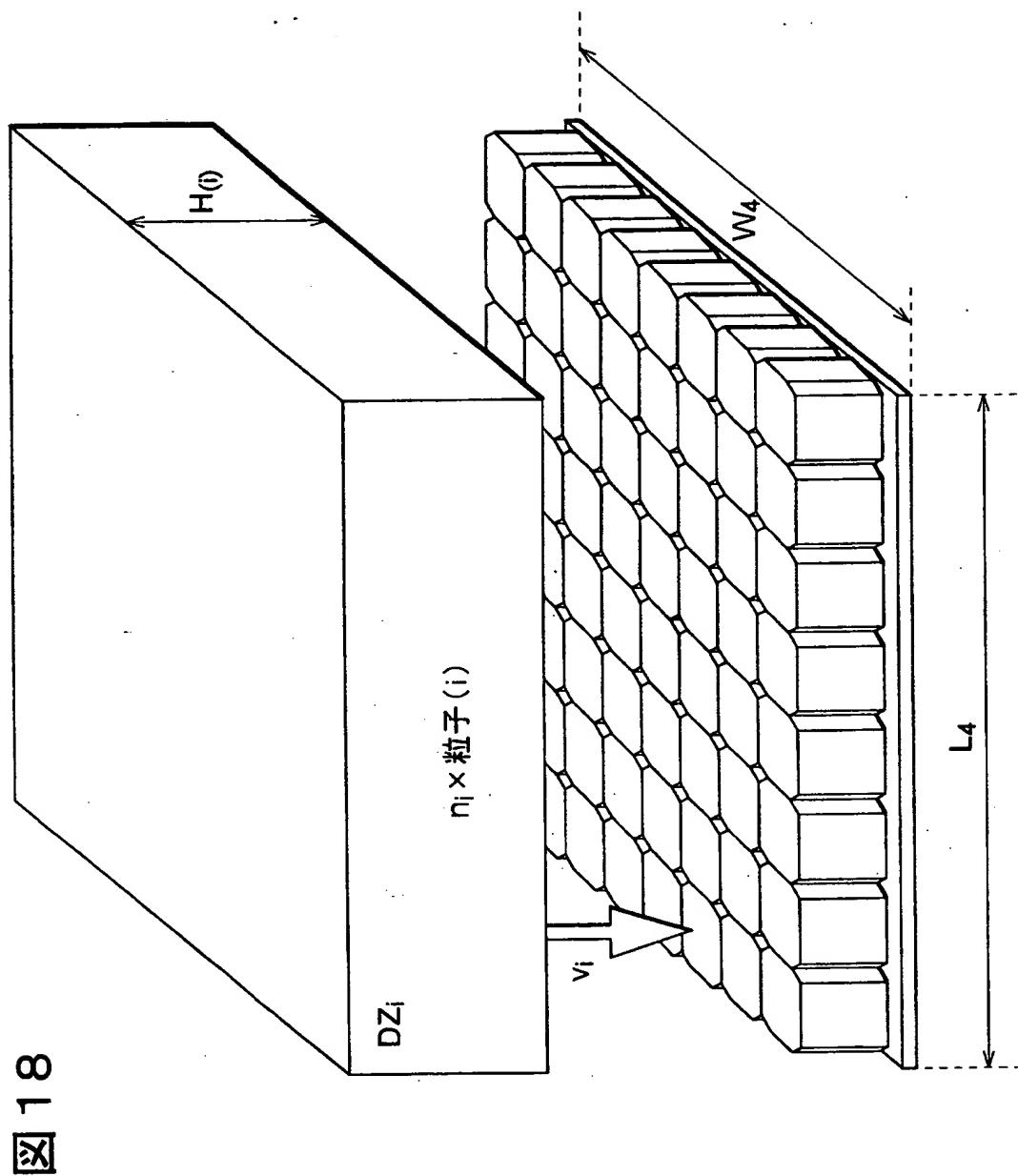


図 19

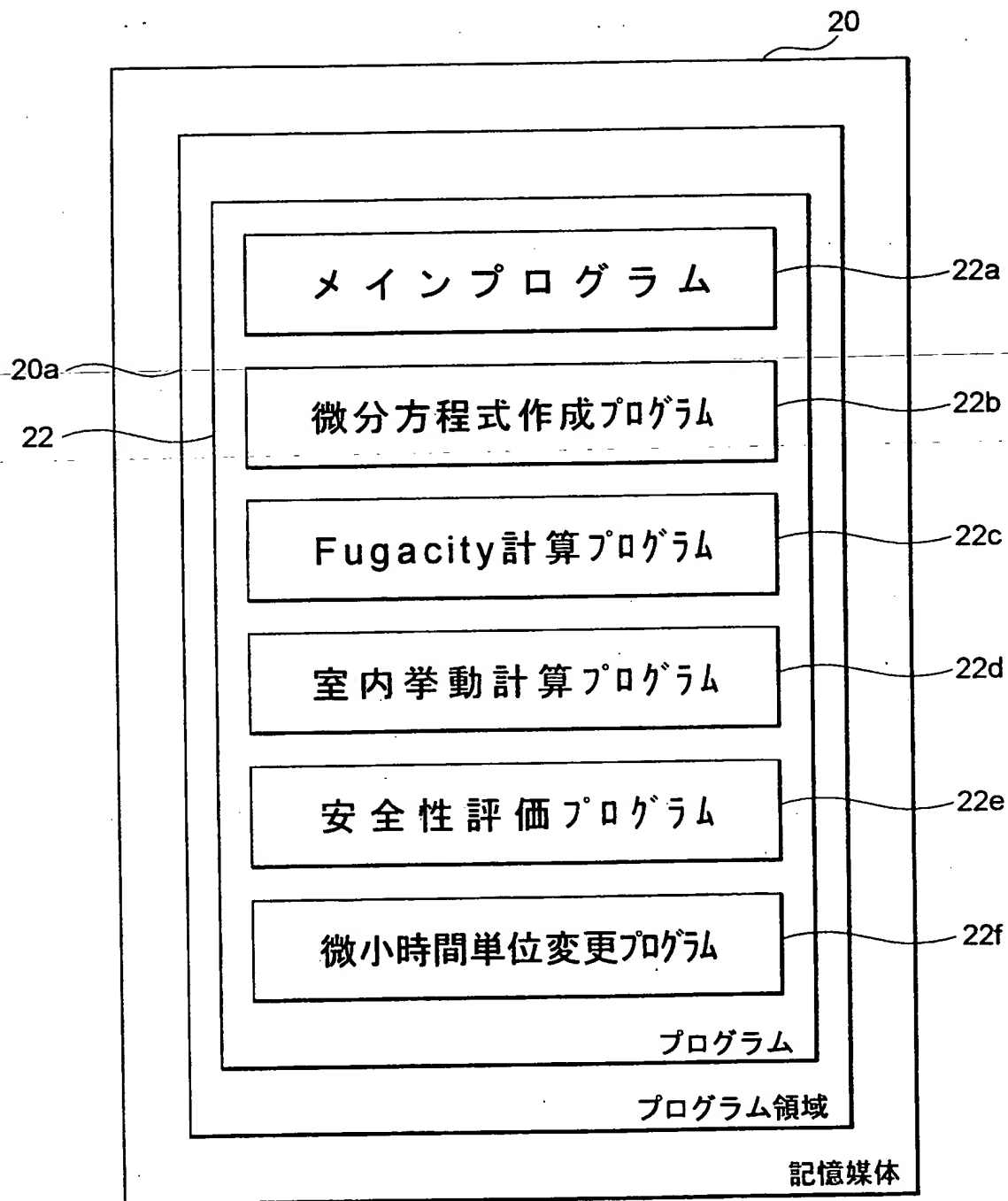


図 20

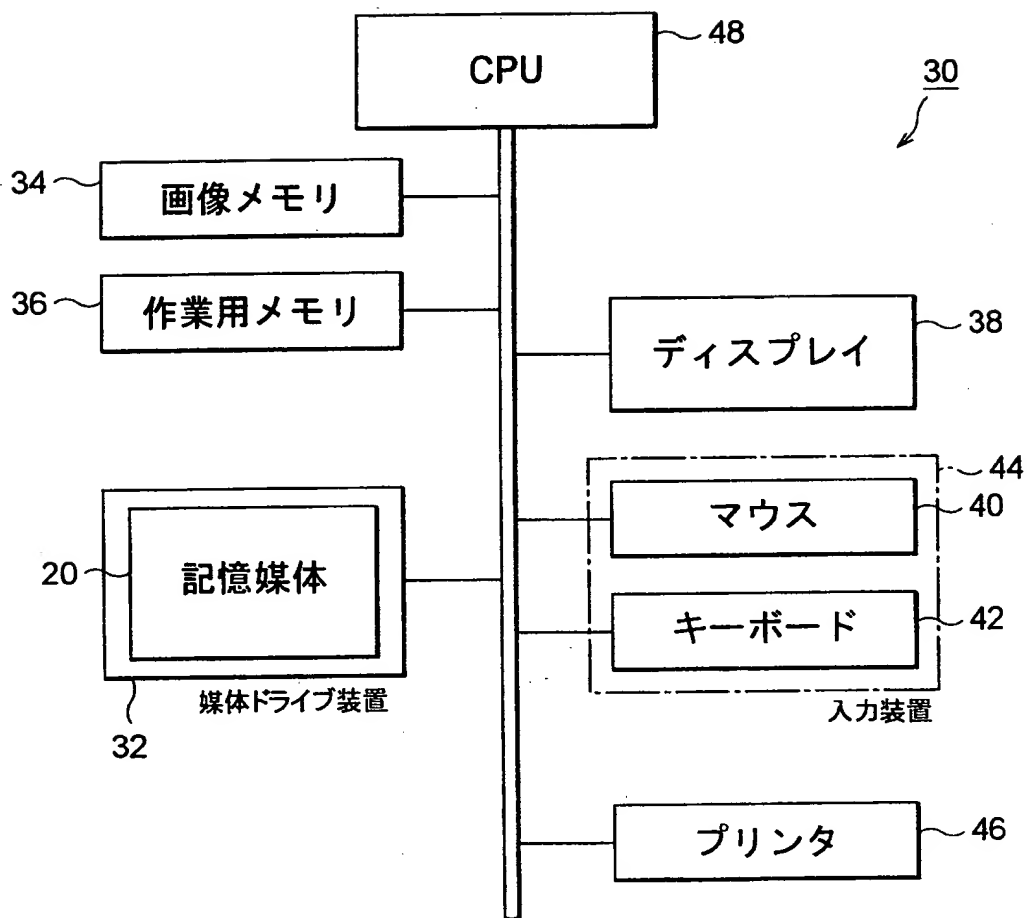
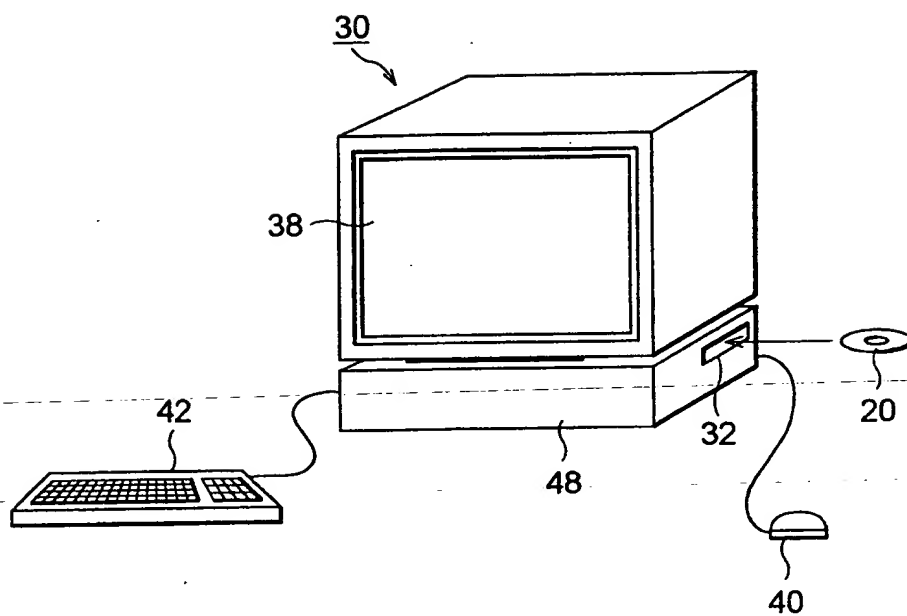


図 21



C (続き) 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'Indoor simulation of insecticides in broadcast spraying', Chemosphere, 1995, Vol. 30, No. 2, p. 345-365.	1-24
A	BUKOWSKI, John A., et al., 'Simulated air levels of volatile organic compounds following different methods of indoor insecticide application.', Environmental science & technology, 1995, Vol. 29, No. 3, p. 673-676.	1-24
A	JP, 8-189909, A (松下電器産業株式会社) 23. 7月. 1996(23. 07. 96) (ファミリーなし)	1-24
A	JP, 6-12398, A (インターナショナル・ビジネス・マシーンス・コーポレーション) 21. 1月. 1994(21. 01. 94) (ファミリーなし)	1-24

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))		
Int. Cl ⁶ A01N25/00, G06F17/00		
B. 調査を行った分野		
調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))		
Int. Cl ⁶ A01N25/00, G06F17/00		
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの		
国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)		
CA (STN), REGISTRY (STN)		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'A simulation of insecticides in indoor aerosol space spraying.', Chemosphere, 1993, Vol. 26, No. 6, p. 1167-1186.	1-24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'Indoor simulation of insecticides supplied with an electric vaporizer by the fugacity model.', Chemosphere, 1994, Vol. 28, No. 4, p. 767-786.	1-24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'An indoor simulation of the behavior of insecticides supplied by an electric vaporizer.', Chemosphere, 1994, Vol. 28, No. 3, p. 435-451.	1-24
<input checked="" type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー 「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの 「E」 先行文献ではあるが、国際出願日以後に公表されたもの 「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す) 「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願		
の日の後に公表された文献 「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの 「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの 「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの 「&」 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日	
16.01.98	27.01.98	
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁 (ISA/J P) 郵便番号100 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	特許庁審査官 (権限のある職員) 唐木 以知良 印	4H 8018
電話番号 03-3581-1101 内線 3443		

International application No.

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Form PCT/ISA/210 (continuation of second sheet) (July 1992)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP97/03924

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int. Cl⁶ A01N25/00, G06F17/00

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int. Cl⁶ A01N25/00, G06F17/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CA (STN), REGISTRY (STN)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'A simulation of insecticides in indoor aerosol space spraying.', Chemosphere, 1993, Vol. 26, No. 6, p. 1167-1186	1 - 24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'Indoor simulation of insecticides supplied with an electric vaporizer by the fugacity model.', Chemosphere, 1994, Vol. 28, No. 4, p. 767-786	1 - 24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'An indoor simulation of the behavior of insecticides supplied by an electric vaporizer.', Chemosphere, 1994, Vol. 28, No. 3, p. 435-451	1 - 24
X	MATOBA, Yoshihide, et al., 'Indoor simulation of insecticides in broadcast spraying.', Chemosphere, 1995, Vol. 30, No. 2, p. 345-365	1 - 24

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.
 ☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier document but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

January 16, 1998 (16. 01. 98)

Date of mailing of the international search report

January 27, 1998 (27. 01. 98)

Name and mailing address of the ISA/

Japanese Patent Office

Facsimile No.

Authorized officer

Telephone No.